



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
Área de Concentração: Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo

GUSTAVO VIEIRA FREZ

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA EM ANSYS – CFD DA COMBUSTÃO *DUAL-FUEL* EM MOTORES DE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO UTILIZANDO DIESEL RENOVÁVEL (HVO) COM BIOGÁS

Itajubá, MG

2022



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA
Área de Concentração: Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo

GUSTAVO VIEIRA FREZ

SIMULAÇÃO FLUIDODINÂMICA EM ANSYS – CFD DA COMBUSTÃO *DUAL-FUEL* EM MOTORES DE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO UTILIZANDO DIESEL RENOVÁVEL (HVO) COM BIOGÁS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Itajubá como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica.
Linha de Pesquisa: Métodos Numéricos Aplicados à Fenômenos de Transporte.

Orientador: Prof. Dr. Christian Jeremi Coronado Rodriguez

Coorientador: Prof. Dr. Fagner Luis Goulart Dias

Itajubá, MG

2022

Gustavo Vieira Frez

Simulação fluidodinâmica em ANSYS – CFD da combustão *dual-fuel* em motores de ignição por compressão utilizando diesel renovável (HVO) com biogás

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Itajubá como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica. Linha de Pesquisa: Métodos Numéricos Aplicados à Fenômenos de Transporte.

Aprovado em 28 de novembro de 2022

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Christian Jeremi Coronado Rodriguez (Orientador)
Instituto de Engenharia Mecânica – UNIFEI

Prof. Dr. Fagner Luis Goulart Dias (Coorientador)
Instituto de Engenharia Mecânica – UNIFEI

Prof. Dr. Andrés Armando Mendiburu Zevallos
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Prof. Dr. Juan Jose Garcia Pabon
Instituto de Engenharia Mecânica – UNIFEI

Itajubá, MG

2022

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, Geraldo (*in memoriam*) e Luzia.

AGRADECIMENTOS

Aos deuses, mestres do tempo e engenheiros do universo, por me proporcionarem a oportunidade de concluir mais uma etapa nessa difícil jornada.

Aos meus pais, Geraldo (*in memoriam*) que foi uma perda imensurável no início do mestrado, em 2021, e Luzia, por sempre me apoiarem e incentivarem a cada dia mais buscar a luz da sabedoria e da razão; por terem guiado meus passos nas direções corretas e à minha irmã, por sua generosidade e amizade e por trazer ao mundo, meu querido sobrinho Lucas.

Aos meus orientadores, profs. Christian e Fagner, pelo valioso tempo destinado à transmissão de conhecimento, orientação, colaboração e direcionamento no desenvolvimento deste trabalho e contribuições valiosas no crescimento acadêmico. Agradecimento especial ao prof. Christian por não hesitar em buscar recursos para o desenvolvimento das simulações computacionais, através do Grupo de Estudos em Tecnologias de Conversão de Energia (GETEC) e do Laboratório de Tecnologia e Planejamento de Sistemas Fotovoltaicos (LTPFV), além de confiar a mim a etapa de desenvolvimento das simulações computacionais relacionadas ao estudo da combustão do HVO.

Ao corpo docente do Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da UNIFEI por contribuírem na minha formação acadêmica.

Aos membros da banca por aceitarem participar da avaliação dessa dissertação e por suas contribuições para melhorias desse trabalho e nas possibilidades de futuros trabalhos.

Aos amigos de longa data, que sempre me apoiaram e incentivaram a buscar a realização de meus sonhos e nunca desistir quando empecilhos se tornavam presentes, de modo especial à Gilza. Aos amigos da república Uteiro que me acolheram na cidade de Itajubá.

Aos amigos e integrantes do grupo GETEC e do projeto ROTA 2030, Túlio, Nelly, Gabriel, Roberto e Luiz Filipe, pela troca de conhecimento, ideias e discussões e auxílio durante o desenvolvimento deste trabalho.

À FUNDEP junto ao Programa ROTA 2030 Linha V no processo nº. 27192*5 pelo apoio financeiro, sem o qual não seria possível a realização deste trabalho.

*“Se achar que precisa voltar, volte!
Se perceber que precisa seguir, siga!
Se estiver tudo errado, comece novamente!
Se estiver tudo certo, continue!”*

Fernando Pessoa – O mais é nada

RESUMO

FREZ, G. V. *Simulação fluidodinâmica em ANSYS – CFD da combustão dual-fuel em motores de ignição por compressão utilizando diesel renovável (HVO) com biogás*. 2022. 219 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2022.

O crescimento populacional e urbano no Brasil nas últimas décadas resultou no aumento da frota veicular nacional que, em geral, utiliza combustíveis fósseis cuja queima resulta em emissões de poluentes. Aliando-se a fatores econômicos, há uma urgente preocupação para substituição desses combustíveis por aqueles provenientes de fontes renováveis. Grande parte de pesquisas nessa área utilizam técnicas experimentais, que nem sempre são viáveis. Assim, aliar análises computacionais à essas técnicas são de grande relevância. Nesse contexto, esse trabalho apresenta análises computacionais do ciclo de combustão de um motor Diesel operando com diesel fóssil, HVO e HVO com biogás. Para tal, modelou-se a geometria 3D da sua câmara de combustão e empregou-se o *software* ANSYS/Forte nas simulações CFD. Na etapa de modelagem considerou-se um modelo cinético com 35 espécies e 74 reações químicas, o modelo RANS RNG $k-\varepsilon$, o modelo KH-RT, um perfil de injeção uniforme e valores experimentais para pressão e temperatura iniciais. Além disso, realizou-se uma análise 0-D no *software* ANSYS/Chemkin-Pro a fim de estimar alguns parâmetros não mensurados experimentalmente e, também para se obter dois modelos cinéticos adaptados para a combustão do HVO puro e da mistura HVO-Biogás, o que foi feito juntamente com um processo de otimização mono-objetiva pelo algoritmo de Lichtenberg. Ambas as abordagens, 0-D e 3D, foram validadas com dados experimentais. Foram obtidas curvas para: pressão no cilindro e sua taxa de aumento; taxa de liberação de calor e seu acúmulo; características de turbulência e emissões em função do ângulo do virabrequim. Campos 3D de velocidade, de temperatura, do *spray* do diesel e das frações molares de CO, CO₂, NO e NO₂ também foram obtidos. Os resultados para a pressão no cilindro obtidos computacionalmente apresentaram boa concordância com os experimentais, que foram obtidos durante o projeto P&D ROTA 2030 realizado pelo GETEC-UNIFEI em 2021 e 2022, porém com maior atraso de ignição. Observou-se que a pressão no cilindro possui forte dependência com a duração da injeção. Verificou-se também que as regiões próximas ao PMS são as que mais causam variações nos parâmetros analisados e onde a maioria das curvas apresentam seus valores máximos. Além disso, a combustão do HVO e do HVO com biogás reduziu os picos de pressão e de liberação de calor, bem como as emissões de NO_x e fuligem, apresentando maior homogeneidade nos campos de velocidade e temperatura.

Palavras-chave: Motor de Combustão Interna. Análise CFD. HVO. *Dual-fuel*. Biogás.

ABSTRACT

FREZ, G. V. *Fluid dynamics simulation in ANSYS – CFD of dual-fuel combustion in compression ignition engine using renewable diesel (HVO) and biogas*. 2022. 219 p. Dissertation (Master of Science in Mechanical Engineering) – Institute of Mechanical Engineering, Federal University of Itajubá, Itajubá, 2022.

Population and urban growth in Brazil in recent decades have increased the national vehicular fleet, which, in general, uses fossil fuels whose burning results in pollutant emissions. Allied with economic factors, there is an urgent concern to replace these fuels with those from renewable sources. Much of the research in this area uses experimental techniques, which are not always feasible. Thus, combining computational analysis with these techniques is of great relevance. In this context, this work analyzed computationally the combustion cycle of a Diesel engine operating with fossil diesel, HVO and HVO with biogas. For this purpose, its 3D combustion chamber geometry was modeled in a CAD software and the CFD simulations were carried on ANSYS/Forte software. A kinetic model with 35 species and 74 chemical reactions, together with the RANS RNG k- ϵ model, the KH-RT model, a uniform injection profile and experimental values for initial pressure and temperature were considered in the modeling step. In addition, a 0-D analysis in ANSYS/Chemkin-Pro software was performed to estimate some parameters not measured experimentally, and also to obtain two adapted kinetics models to describe the of pure HVO and HVO-biogas blend, which was done together with a mono-objective optimization process by the Lichtenberg algorithm. Both 0-D and 3D approaches were validated with experimental data. From the simulations, in-cylinder pressure and its rise rate, rate of heat release, and its accumulation, turbulence, and emissions characteristics were obtained as a function of crank angle. 3D fields of velocity, temperature, the spray of diesel, and molar fractions of CO, CO₂, NO, and NO₂ were also obtained. The in-cylinder pressure obtained computationally showed a good agreement with the experimental ones (which were obtained from the R&D project ROTA 2030 by GETEC-UNIFEI at 2021 and 2022), but with a longer ignition delay. It was observed that the in-cylinder pressure is strongly dependent on the duration of injection. It was also verified that the regions closer to the TDC presented the most variations in the analyzed parameters and with the maximum values. Besides, the combustion of HVO and HVO with Biogas reduced the peaks of pressure and heat release, as well as NO_x and soot emissions and also presented more significant homogeneity in the velocity and temperature fields.

Key words: Internal Combustion Engine. CFD Analysis. HVO. Dual-fuel. Biogas.

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

0D	Modelo zero-dimensional
1D, 2D, 3D	Unidimensional, bidimensional, tridimensional
AC, AFR	Razão Ar-Combustível, do inglês <i>Air-Fuel Ratio</i>
AHRR	Taxa de liberação de calor, do inglês <i>Apparent Heat Release Rate</i>
ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
CAD	Ângulo do virabrequim, do inglês <i>Crank Angle Degree</i>
CFD	Dinâmica dos fluidos computacional, do inglês <i>Computational Fluid Dynamics</i>
CH ₄	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO ₂	Dióxido de carbono
D35sp	Modelo cinético com 35 espécies
DF	<i>Dual-fuel</i>
DOI	Duração da injeção, do inglês <i>Duration Of Injection</i>
EGR	Sistema de recirculação dos gases de escape, do inglês <i>Exhaust Gas Recirculation</i>
EOI	Fim da injeção do combustível primário, do inglês <i>End Of Injection</i>
EP	Erro Percentual
EVO	Abertura da válvula de exaustão, do inglês <i>Exhaust Valve Opening</i>
FUNDEP	Fundação de Desenvolvimento da Pesquisa
GETEC	Grupo de Estudos em Tecnologias de Conversão de Energia
HC	Hidrocarbonetos
HVO	Óleo vegetal hidrogenado, do inglês, do inglês <i>Hydrotreated Vegetable Oil</i>
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia Estatística

IMEP	Pressão média efetiva indicada, do inglês <i>Indicated Mean Effective Pressure</i>
IVC	Fechamento da válvula de admissão, do inglês <i>Intake Valve Closure</i>
KH	Modelo de Kelvin-Helmholtz
LB	Limites inferiores, do inglês <i>Lower Bounds</i>
LMT	Laboratório de Máquinas Térmicas
LTPFV	Laboratório de Tecnologia e Planejamento de Sistemas Fotovoltaicos
MCI	Motor de Combustão Interna
MM	Massa Molar
MP, PM	Material Particulado, do inglês <i>Particulate Matter</i>
N ₂	Molécula de gás nitrogênio
NO	Monóxido de nitrogênio
NO ₂	Dióxido de nitrogênio
NO _x	Óxidos de nitrogênio
O ₂	Molécula de gás oxigênio
OB	Limites originais, do inglês <i>Original Bounds</i>
PCI	Poder Calorífico Inferior
PMI, BDC	Ponto Morto Inferior, do inglês <i>Bottom Dead Center</i>
PMS, TDC	Ponto Morto Superior, do inglês <i>Top Dead Center</i>
PROCONVE	Programa de Controle de Poluição do Ar por Veículos Automotores
PRR	Taxa de aumento da pressão, do inglês <i>Pressure Rise Rate</i>
RANS	Equações das médias de Reynolds para as equações de Navier-Stokes, do inglês <i>Reynolds Average Navier-Stokes</i>
RC, CR	Razão de Compressão, do inglês <i>Compression Ratio</i>
RNG	Grupos de Renormalizações, do inglês <i>Re-Normalisation Group</i>
RT	Modelo de Rayleigh-Taylor

SFC	Consumo específico de combustível, do inglês <i>Specific Fuel Consumption</i>
SOC	Início da combustão, do inglês <i>Start Of Combustion</i>
SOI	Início da injeção do combustível primário, do inglês <i>Start Of Injection</i>
SOx	Óxidos de Enxofre
TKE	Energia cinética turbulenta, do inglês <i>Turbulent Kinetic Energy</i>
UB	Limites superiores, do inglês <i>Upper Bounds</i>
UHC	Hidrocarbonetos não-queimados, do inglês <i>Unburnt Hydrocarboon</i>
VC	Volume de Controle
VOC	Componentes orgânicos voláteis, do inglês <i>Volatile Organic Compounds</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Δs	curso do pistão
D	diâmetro do pistão
L	comprimento da biela
r	raio da manivela
ω	velocidade angular de rotação da árvore de manivelas
V_1, V_2, V_{du}	volumes morto, total e deslocado útil da câmara de combustão
z	número de cilindros
RC	razão de compressão, ou relação volumétrica
θ	ângulo do virabrequim
v_p	velocidade do pistão
x	distância para o pistão atingir o PMS
w_c, w_{exp}, w_{comp}	trabalhos total, de expansão e de compressão do ciclo
q_c, q_{ent}, q_{sai}	calor total, calor de entrada e calor de saída do ciclo
u_f, u_i	energias internas final e inicial do ciclo
c_p, c_v	calores específicos à pressão constante e à volume constante
η_c	eficiência do ciclo
T	temperatura
p	pressão
v	volume específico
V	volume
W_i	trabalho indicado líquido
$\dot{W}_i$	potência indicada líquida
N	rotação do motor, em rpm
n_c	número de ciclos do motor
τ	torque desenvolvido pelo motor

η_{mec}	rendimento, ou eficiência, do motor
$\dot{m}_f$	vazão mássica de combustível
m_{ar}, m_f	massa de ar e de combustível
ϕ	razão de equivalência
λ	fator lambda
M_b	massa molecular dos gases queimados
m_{RP}	massa da mistura queimada e não queimada por mol de O
n_b	número de mols do gás queimado
$\bar{R}$	constante universal dos gases ideais
ρ	massa específica
$\dot{\rho}$	taxa de geração e massa específica
$\mathbf{u}$	vetor velocidade do escoamento
D	coeficiente de difusão molecular
$\mathbf{g}$	vetor aceleração da gravidade
$\boldsymbol{\sigma}$	tensor de tensões viscosas
$\boldsymbol{\Gamma}$	tensor de tensões de Reynolds
ν, μ	viscosidades cinemática e dinâmica
U	energia interna específica
ε	taxa de dissipação de energia cinética turbulenta
k	energia cinética turbulenta
λ_t	condutividade térmica
k_i, A_i, B_i, E_i	i -ésima constante cinética, i -ésimo fator pré-exponencial, i -ésimo fator de temperatura, i -ésima energia de ativação na lei de Arrhenius
R^2	coeficiente de determinação de ajuste de curvas
SQ_{res}, SQ_{tot}	somas quadráticas dos resíduos e do total
$ER_{P_{m\acute{a}x}}, ER_{SOC}$	erro relativo para o pico de pressão no cilindro e para o início da combustão
EP_{total}	erro percentual total do processo de otimização
$W_{P_{m\acute{a}x}}, W_{SOC}, W_{R^2}$	peso relativo à pressão máxima, ao início da combustão e ao coeficiente R^2 no processo de otimização

$\dot{M}M_{ar},$ $\dot{M}M_{biogás}$	vazões molares de ar e de biogás
$MM_{ar},$ $MM_{biogás}$	massas molares de ar e de biogás
$x_{ar}, x_{biogás},$ $x_{O_2}, x_{N_2},$ $x_{CH_4}, x_{CO_2},$	frações molares de ar, biogás, oxigênio, nitrogênio, metano e dióxido de carbono
Δt	variação, ou passo, temporal
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	passos espaciais nas direções x , y e z
p_0	pressão inicial
T_0	temperatura inicial
$\dot{m}_{cp}, \dot{m}_{cs}$	vazões mássicas dos combustíveis primário e secundário
T_{fuel}	temperatura do combustível
T_{wall}	temperatura da parede
X_{sim}, X_{exp}	medidas obtidas dos resultados de simulações e de experimentos

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Posições do pistão de um MCI.....	24
Figura 2 – Frota de automóveis no Brasil entre os anos 2008 e 2018	26
Figura 3 – Evolução do uso/dependência de combustíveis no setor de transportes brasileiro.....	26
Figura 4 – Representação esquemática da <i>port injection</i> no modo <i>dual-fuel</i>	28
Figura 5 – Comparação do tempo dos modelos de simulação de motor biodiesel ...	33
Figura 6 – Representação esquemática do funcionamento geral de um MCI	56
Figura 7 – Representação esquemática do conjunto biela-manivela, de um MCI.....	57
Figura 8 – Quatro tempos de um motor de combustão interna	59
Figura 9 – Variação da pressão no cilindro de um MCI 4 tempos	60
Figura 10 – Diagramas $P-v$ e $T-s$ para motores ciclo diesel ideais	61
Figura 11 – Diagrama $P-v$ ideal e real para MCI por compressão	64
Figura 12 – Relações de algumas características da combustão de um MCI com o fator λ	69
Figura 13 – Esquema simplificado de produção do HVO	75
Figura 14 – Estimativa de produção de HVO puro e coprocessado em execução, ou anunciados, e sua comparação entre 2020 e 2025.....	76
Figura 15 – Esquema das reações no hidrocessamento de um triglicerídeo	77
Figura 16 – HVO produzido pela Neste e sua queima comparada com o diesel convencional	77
Figura 17 – Esquematização do ciclo de produção do biogás e suas aplicações	79
Figura 18 – Produção mundial energética de biogás	80
Figura 19 – Emissões brutas para motores de ciclo Otto e Diesel	85
Figura 20 – Limites de emissões de poluentes, veículos Diesel, nas fases do PROCONVE.....	89
Figura 21 – Tela inicial do ANSYS Forte 2022 R1 Simulate	91
Figura 22 – Motor Buffalo modelo BFDE 10.0.....	92
Figura 23 – Imagens reais do cabeçote do motor, do pistão, do injetor e das válvulas	93
Figura 24 – CAD desenvolvido para a câmara de combustão no PMS.....	94
Figura 25 – Sub-volumes para a câmara de combustão no PMS do pistão.....	95

Figura 26 – Elementos da face “Periodic A” para uma malha muito grosseira.....	98
Figura 27 – Gráfico de Arrhenius da reação $nC_7H_{16} + H \rightarrow C_7H_{16-2} + H_2$	109
Figura 28 – Caminhos da reação para o n-heptano para 10 espécies principais....	110
Figura 29 – Taxas de liberação de calor para as reações do n-heptano.....	114
Figura 30 – Análise de sensibilidade para a taxa de produção do n-heptano	115
Figura 31 – Passo a passo do processo de adaptação do modelo cinético	116
Figura 32 – Taxas de liberação de calor para as reações do metano.....	119
Figura 33 – Regiões de separação de gotículas no modelo híbrido KH/RT	122
Figura 34 – Representação esquemática do bocal e da direção do <i>spray</i>	127
Figura 35 – Temperaturas das paredes consideradas nas simulações	131
Figura 36 – Definição da mistura inicial dos gases na câmara de combustão (IVC <i>mixture</i>) para o caso <i>dual-fuel</i>	133
Figura 37 – Modelagem 0-D realizada no Chemkin-Pro	139
Figura 38 – Motor instrumentado utilizados nos testes experimentais que serviram de base para análises das simulações.....	141
Figura 39 – Variação experimental da pressão no cilindro <i>versus</i> ângulo do virabrequim para os diversos combustíveis e misturas	143
Figura 40 – Efeito da duração da injeção na curva de pressão no cilindro	145
Figura 41 – Efeito da duração da injeção no valor máximo de AHRR.....	146
Figura 42 – Efeito da temperatura do combustível na curva de pressão no cilindro	147
Figura 43 – Efeito da temperatura da parede na curva de pressão no cilindro	148
Figura 44 – Validação da curva de pressão no cilindro CFD para o diesel puro com ajustes de parâmetros da simulação 3D considerando a malha mais refinada.....	149
Figura 45 – Taxa de aumento de pressão no cilindro (PRR) para o diesel puro	150
Figura 46 – Taxa de liberação de calor e estimativa do início da combustão do diesel puro	152
Figura 47 – Calor liberado acumulado para a combustão do diesel puro	152
Figura 48 – Variação da posição e da velocidade do pistão e do volume da câmara de combustão do motor pistão em função do ângulo do virabrequim	154
Figura 49 – Diagrama <i>p-v</i> obtido computacional e experimentalmente para o diesel puro	154
Figura 50 – Massa total de diesel injetada na câmara de combustão e perfil de injeção	155

Figura 51 – Variação da razão de <i>swirl</i> para o diesel puro	156
Figura 52 – Análise dos parâmetros de turbulência para a combustão do diesel puro	157
Figura 53 – Variação das emissões de poluentes em função do ângulo do virabrequim para a combustão do diesel puro	159
Figura 54 – Emissões de NO _x e fuligem em função do ângulo do virabrequim pro diesel puro	161
Figura 55 – Variação do passo temporal em função do ângulo do virabrequim pro diesel puro.....	161
Figura 56 – Variação 3D das partículas do <i>spray</i> do diesel para diversos ângulos do virabrequim (CAD).....	163
Figura 57 – Variação 3D da velocidade das partículas do <i>spray</i> de diesel para diversos CAD.....	164
Figura 58 – Campos 3D da magnitude de velocidade dos fluidos da câmara de combustão para diversos CAD na combustão do diesel	166
Figura 59 – Campos 3D de temperatura dos fluidos da câmara de combustão para diversos CAD na combustão do diesel.....	167
Figura 60 – Campos 3D de fração molar de CO para diversos CAD na combustão do diesel	169
Figura 61 – Campos 3D de fração molar de CO ₂ para diversos CAD na combustão do diesel	170
Figura 62 – Campos 3D de fração molar de NO para diversos CAD na combustão do diesel	171
Figura 63 – Campos 3D de fração molar de NO ₂ para diversos CAD na combustão do diesel	172
Figura 64 – Curvas de pressão no cilindro obtidas na análise da independência de malha	173
Figura 65 – Zoom da curva de pressão no cilindro para análise da independência de malha	174
Figura 66 – Análise da independência de malha para a taxa de liberação de calor	175
Figura 67 – Variação do tempo de simulação para otimização do fator pré-exponencial da lei de Arrhenius para o HVO puro	179
Figura 68 – Variação do coeficiente R ² para todas as rodadas obtidas no processo de otimização para adaptação do modelo cinético para o HVO puro.....	180

Figura 69 – Variação do erro percentual total final ponderado para a adaptação do modelo cinético para o HVO puro	180
Figura 70 – Validação da curva de pressão no cilindro CFD para o HVO puro com o modelo cinético adaptado e com a malha intermediária	182
Figura 71 – Diagrama $p-v$ obtido experimental e computacionalmente para o HVO puro	182
Figura 72 – Taxa de liberação de calor obtida nas simulações CFD para o HVO puro e estimativa do início da combustão (SOC)	183
Figura 73 – Variação do tempo de simulação para otimização do fator pré-exponencial da lei de Arrhenius para o HVO com biogás na vazão de 0,2 kg/h	185
Figura 74 – Variação do coeficiente R^2 para todas as rodadas obtidas no processo de otimização do modelo cinético adaptado para o HVO com biogás	186
Figura 75 – Variação do erro percentual total final ponderado para obtenção do modelo cinético adaptado para o HVO com biogás	186
Figura 76 – Validação da curva de pressão no cilindro CFD para a combustão de HVO com biogás empregando a malha intermediária.....	188
Figura 77 – Comparação dos diagramas $p-v$ para a mistura de HVO com biogás .	189
Figura 78 – Taxa de liberação de calor obtida nas simulações CFD para o HVO com biogás e estimativa do início da combustão (SOC).....	189
Figura 79 – Comparação das pressões no cilindro para a combustão de diesel puro, HVO puro e HVO com biogás obtidas nas simulações CFD	190
Figura 80 – Comparação das taxas de aumento de pressão (PRR) para a combustão de diesel puro, HVO puro e HVO com biogás obtidas das simulações CFD	191
Figura 81 – Comparação das taxas de liberação de calor obtidas das simulações para o diesel puro, o HVO puro e a mistura de HVO com biogás	192
Figura 82 – Comparação das emissões de NOx e fuligem para a combustão de diesel puro, HVO puro e HVO com biogás obtidas pelas simulações 3D no Forte	193
Figura 83 – Campos 3D da magnitude de velocidade, para os três combustíveis, considerando diversos CAD	194
Figura 84 – Campos de temperatura, para os três combustíveis, considerando diversos CAD	196
Figura 85 – Campos de emissões no final das simulações (ponto de abertura da válvula de exaustão) para os três combustíveis.....	197
Figura 86 – Malha grosseira para a câmara de combustão no PMS.....	217

Figura 87 – Malha intermediária para a câmara de combustão no PMS.....	217
Figura 88 – Malha refinada para a câmara de combustão no PMS	218
Figura 89 – Malha muito refinada para a câmara de combustão no PMS.....	218

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Propriedades físico-químicas do diesel S10.....	73
Tabela 2 – Propriedades físico-químicas do HVO.....	74
Tabela 3 – Composição do biogás para diferentes matérias-primas.....	78
Tabela 4 – Propriedades físico-químicas do biogás.....	83
Tabela 5 – Normas EURO para controle de emissões de veículos pesados	84
Tabela 6 – Alguns efeitos nocivos dos principais poluentes emitidos por MCIs.....	85
Tabela 7 – Algumas especificações técnicas do motor Buffalo BFDE 10.0	93
Tabela 8 – Número de elementos e de vértices para cada superfície e as malhas “base”	96
Tabela 9 – Características das malhas “base” para análise da independência de malha	97
Tabela 10 – Constantes padrões dos modelos RANS de turbulência.....	106
Tabela 11 – Síntese dos dados experimentais utilizados nas simulações	143
Tabela 12 – Análise de algumas características do ciclo de combustão considerando a qualidade das malhas 3D da câmara de combustão.....	176
Tabela 13 – Resultados dos fatores pré-exponenciais para o modelo cinético HVO Puro, com o melhor ajuste após 50 interações	178
Tabela 14 – Resultados dos fatores pré-exponenciais para o modelo cinético <i>dual-fuel</i> do HVO com biogás na vazão de 0,2 kg/h, com o melhor ajuste após 459 rodadas	184

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	24
1.1 Justificativa e Motivação.....	29
1.2 Objetivo Geral	30
1.3 Objetivos Específicos	30
1.4 Estrutura do Trabalho.....	30
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	32
2.1 Combustão <i>Dual-Fuel</i>	34
2.2 Combustão <i>Dual-Fuel</i> com HVO	44
2.3 Combustão <i>Dual-fuel</i> com Biogás	49
3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	56
3.1 Motores de Combustão Interna	56
3.1.1 Ciclos termodinâmicos de MCI's Diesel	60
3.1.2 Parâmetros de Desempenho e Consumo de Combustível.....	64
3.1.3 Processos de Combustão em MCI	67
3.1.4 Estimação da Temperatura Média dos Gases no Cilindro	70
3.2 Combustíveis.....	72
3.2.1 Diesel	72
3.2.2 HVO.....	73
3.2.3 Biogás	78
3.3 Emissões de Poluentes	83
3.3.1 Monóxido de Carbono	86
3.3.2 Dióxido de Carbono.....	86
3.3.3 Óxido de Nitrogênio.....	87
3.3.4 Hidrocarbonetos Não Queimados	87
3.3.5 Material Particulado.....	87
3.3.6 Compostos de Enxofre	88
3.3.7 Controle de Emissões em Motores Diesel.....	88
4 METODOLOGIA EMPREGADA NA SIMULAÇÃO DE MCI's.....	91
4.1 Visão Geral do Ansys Forte.....	91
4.2 Geometria.....	93
4.3 Malha.....	96

4.4 Modelagem Matemática	100
4.4.1 Equações de Conservação	100
4.4.2 Modelagem da Turbulência	103
4.4.3 Modelagem da Cinética Química e da Velocidade de Chama	106
4.4.3.1 Adaptação de Modelos Cinéticos para HVO e HVO-Biogás	111
4.4.4 Modelagem da Injeção do Combustível Primário (<i>Spray</i>)	120
4.4.5 Modelos de Predição de Fuligem	128
4.5 Condições de Contorno e Inicial	129
4.5.1 Condições de Contorno	129
4.5.2 Condições Iniciais	131
4.6 Controles da Simulação e Métodos de Solução	133
4.7 Demais Configurações e Controles da Simulação	136
4.8 Monitoramento da Simulação	137
4.9 Pós-processamento	138
4.10 Modelagem 0-D no Chemkin-Pro	138
4.11 Bancada Experimental	139
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES	142
5.1 Dados e Resultados Obtidos Experimentalmente	142
5.2 Combustão <i>Single-fuel</i> com Diesel	144
5.2.1 Resultados da Análise 0-D	144
5.2.1.1 Análise do efeito da duração da injeção	145
5.2.1.2 Análise do efeito da temperatura do combustível	146
5.2.1.3 Análise do efeito da temperatura na parede	147
5.2.2 Resultados para a Validação do Modelo 3D no Forte	148
5.2.3 Análise de Independência de Malha	173
5.3 Combustão <i>Single-fuel</i> com HVO	177
5.3.1 Adaptação do modelo cinético para HVO	177
5.3.2 Simulações 3D para a combustão do HVO	181
5.4 Combustão <i>Dual-fuel</i> com HVO e Biogás	183
5.4.1 Adaptação do modelo cinético para HVO com Biogás	184
5.4.2 Simulações 3D para a combustão do HVO com Biogás	187
5.5 Análises Gerais da Combustão Para Todos os Combustíveis	190
6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	198
6.1 Conclusões Gerais	198

6.2 Sugestões de Trabalhos Futuros	201
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	203
ANEXO A – MECANISMO DA REAÇÃO DO DIESEL PARA 35 ESPÉCIES	215
APÊNDICE A – REPRESENTAÇÃO 3D DAS MALHAS COMPUTACIONAIS DA CÂMARA DE COMBUSTÃO EMPREGADAS NESSE TRABALHO	217
APÊNDICE B – EXEMPLO DE CÁLCULO PARA OBTENÇÃO DAS FRAÇÕES MOLARES DAS ESPÉCIES PRESENTES NA CÂMARA DE COMBUSTÃO NA CONDIÇÃO INICIAL DE SIMULAÇÃO	219

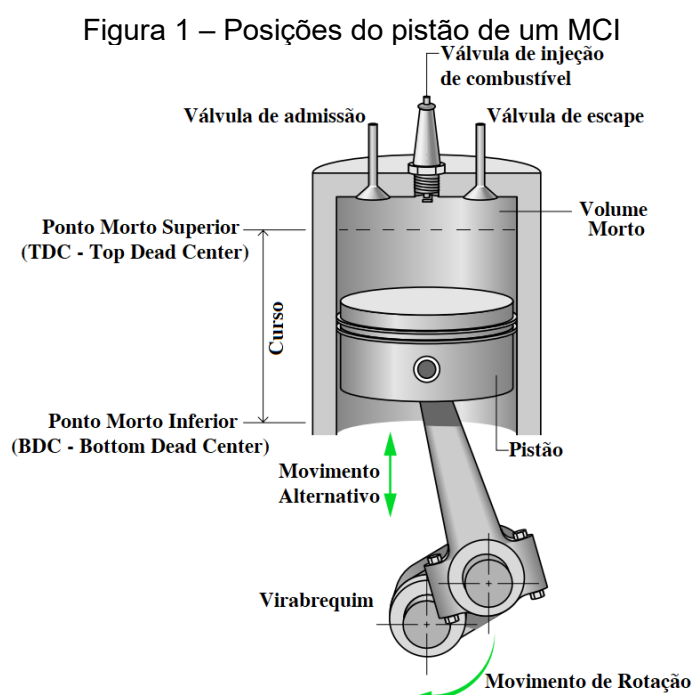
1 INTRODUÇÃO

Uma máquina térmica muito utilizada ao longo das últimas décadas é o motor de combustão interna (MCI). Esse tipo de motor, que utiliza a queima de um combustível para gerar trabalho (transforma a energia química em energia mecânica), está presente na grande maioria dos veículos automotores utilizados pela sociedade.

Há dois tipos de motores de combustão interna: os de êmbolo rotativo e os de pistão, sendo este último o tipo mais comum e utilizado nos ciclos Otto (que utiliza como combustível principal a gasolina) e Diesel (que utiliza como combustível principal o diesel) presentes nos automóveis.

O processo que dá início à combustão, denominado ignição, pode ser feito de duas formas para os motores alternativos (motores de pistão) através de faísca (ou centelha), para os motores de ciclo Otto, ou por compressão, para os motores de ciclo Diesel (BRUNETTI, 2012; HEYWOOD, 2018).

O interesse deste trabalho está nos motores de autoignição (ignição por compressão). Para compreender como é dado o processo de ignição, é necessário definir as posições do pistão. A Figura 1 apresenta as duas posições principais posições de um MCI: o ponto morto superior (TDC – *Top Dead Center*, do inglês) e o ponto morto inferior (TBC – *Top Bottom Center*, do inglês).



Fonte: Adaptado de Moran e Shapiro (2006).

Os pontos mortos superior (PMS) e inferior (PMI) definem o curso do pistão e referem-se às distâncias mínima e máxima do pistão em relação ao cabeçote, respectivamente, e aos ângulos em relação ao virabrequim, 0° para o TDC e 180° para o BDC (FERGUSON e KIRKPATRICK, 2016). O volume morto é também conhecido como volume da câmara de combustão (BRUNETTI, 2012).

Grande parte dos motores Diesel utilizados em veículos possuem seu funcionamento em quatro fases, sendo também denominadas quatro tempos, compreendendo:

1) Admissão: a válvula de admissão se abre (a válvula de escape está fechada) para permitir a entrada de ar no cilindro, enquanto o pistão desce até o ponto morto inferior.

2) Compressão: todas as válvulas estão fechadas e o pistão sobe em direção ao ponto morto superior, comprimindo o ar e, assim, ocasionando aumento da pressão e, conseqüentemente, da temperatura.

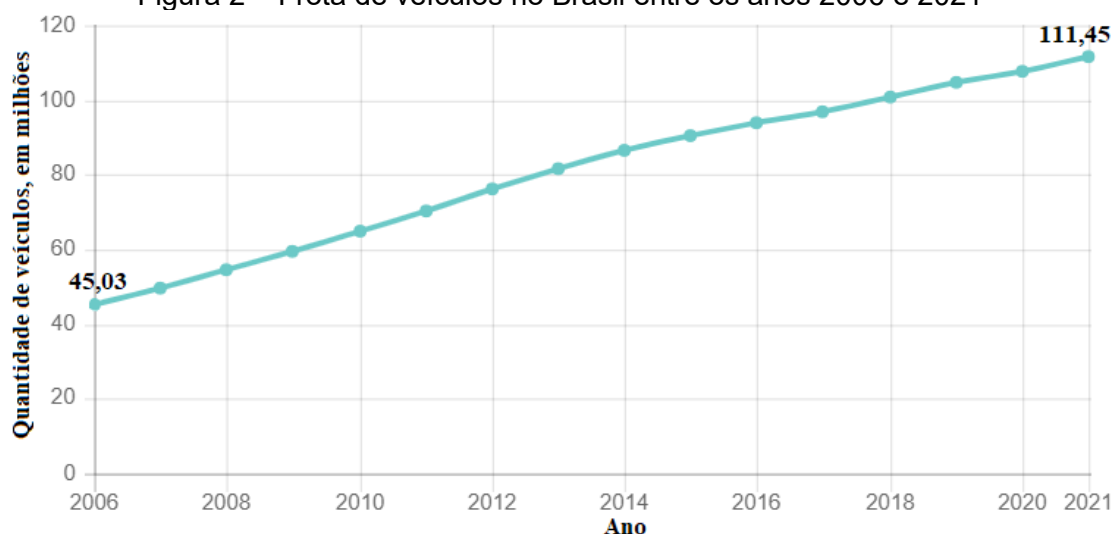
3) Combustão e expansão: antes do PMS, o combustível é injetado e o pistão continua subindo de forma que a ignição ocorre de forma espontânea. A combustão resulta em um grande aumento da pressão que força o pistão para baixo.

4) Exaustão: a válvula de escape é aberta (a válvula de admissão se mantém fechada) e os gases resultantes da queima são expelidos, enquanto o pistão movimenta-se na direção do ponto morto inferior e processo à etapa 1.

Na etapa 3 o motor realiza todo o trabalho onde parte será consumido pelas demais etapas e parte é transferida na forma útil para o motor.

Com o aumento da população, da urbanização e, conseqüentemente, do aumento da demanda logística, que é fortemente dependente do modelo rodoviário no Brasil, a frota de veículos de motores de combustão interna é cada vez maior. Segundo o Instituto Brasileiro de Geografia Estatística (IBGE), cujo site, consultado no ano de 2022, apresenta a quantidade de veículos entre os anos de 2006 e 2021, o total de veículos no Brasil passou de 45,03 milhões para 111,45 milhões ao longo desses 15 anos, o que representa um aumento de 147,5%, como pode ser observado na Figura 2.

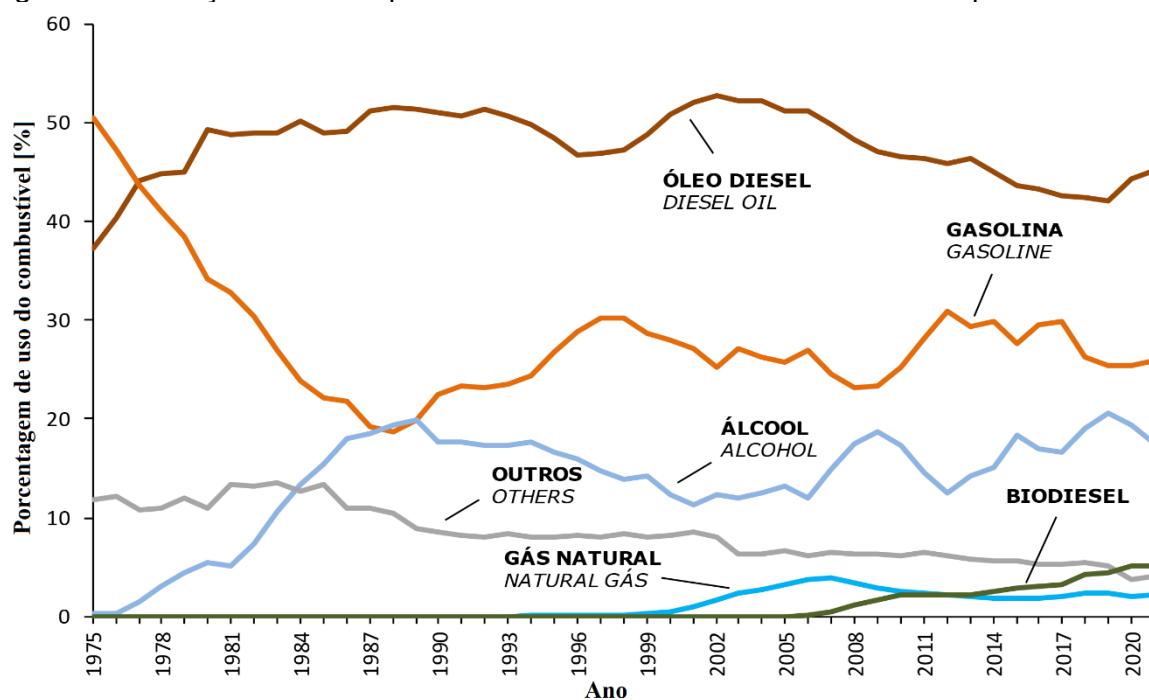
Figura 2 – Frota de veículos no Brasil entre os anos 2006 e 2021



Fonte: Adaptado de IBGE (2022).

Grande parte dos veículos da frota brasileira possui motores a combustão interna por centelha, de ciclo Otto, que utilizam a gasolina e por compressão, de ciclo Diesel, que utilizam o diesel como combustível. A forte dependência nacional desses combustíveis fósseis pelo setor de transporte pode ser observada através do gráfico apresentado na Figura 3.

Figura 3 – Evolução do uso/dependência de combustíveis no setor de transportes brasileiro



Fonte: Adaptado de Empresa de Pesquisa Energética (2022).

Analisando a Figura 3, nota-se que o Brasil consome grande quantidade de óleo diesel no setor de transporte, o que é facilmente compreendido haja visto a

predominância da utilização da malha rodoviária, principalmente por caminhões, pelo setor logístico nacional.

A utilização desses combustíveis convencionais, que são provenientes do petróleo, que é uma fonte de energia não renovável, se esgotarão com o tempo. Além disso, sua queima gera gases nocivos ao meio ambiente e aos seres humanos. Dessa forma, ao longo dos últimos anos houve uma crescente preocupação relacionada a questões de sustentabilidade que visam promover ações para a redução das emissões desses gases, impulsionando a inserção de fontes renováveis de energias alternativas e, dessa maneira, reduzindo a dependência desses combustíveis fósseis, tanto no setor de transporte, quanto na matriz energética como um todo. Outro fator que vem chamado a atenção nacionalmente nos últimos anos para a inserção de combustíveis provenientes de fontes renováveis é o aumento no preço dos combustíveis fósseis. Dessa forma, aliam-se fatores econômicos, ambientais, sustentáveis e tecnológicos nessa mudança de paradigmas.

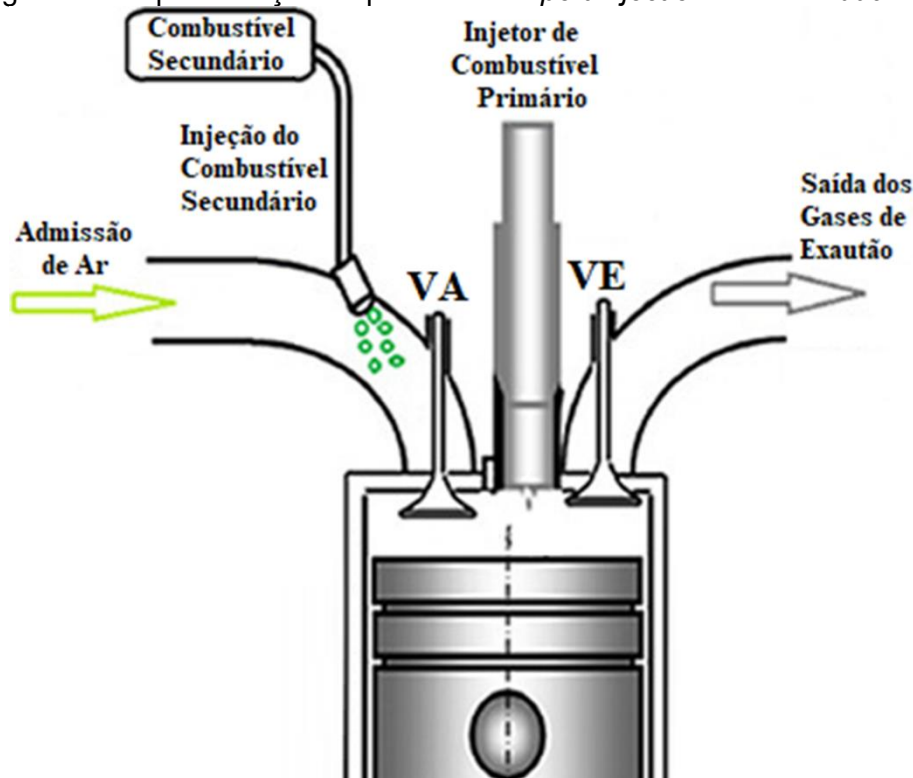
Nessa direção, segundo Da Costa (2017), a utilização de MCI, que utilizam gás natural ou biocombustíveis, apresenta importante relevância na matriz energética mundial. No entanto, a utilização apenas desses combustíveis em grande escala é inviável. Isto posto, o desenvolvimento de tecnologias que considerem a utilização conjunta de um combustível fóssil, como o diesel, e um combustível renovável, como o etanol ou biogás, é uma tecnologia em potencial. Pode-se ainda empregar um combustível também renovável para o diesel, como o HVO ou farnesano. Segundo Da Silva (2014), essa tecnologia é conhecida como *dual-fuel* e vem se tornando popular, uma vez que ela:

- opera com mais de uma fonte de combustível;
- reduz a quantidade de diesel utilizado como combustível;
- reduz as emissões de poluentes, melhorando a qualidade do ar;
- não exige modificação nos motores diesel, ou exigem conversão relativamente simples quando for o caso para operar no modo *dual-fuel*;
- mantém a potência original (seja no modo *single* ou *dual-fuel*);
- proporciona lubrificação das válvulas e anéis pelo diesel (combustível piloto).

O modo *dual-fuel* considerado nesse trabalho é utiliza a injeção do tipo *port injection*, ou seja, a injeção do combustível secundário (ou de baixa reatividade) é realizada no tubo de admissão e mistura-se com o ar adentrando-se na câmara de

combustão. A Figura 4 traz uma representação esquemática desse tipo de injeção considerado no modo *dual-fuel* empregado neste trabalho e nos testes experimentais realizados no Projeto ROTA 2030. Nesse trabalho de mestrado, considerou-se como combustíveis primários o diesel ou o HVO e, como combustível secundário, o biogás.

Figura 4 – Representação esquemática da *port injection* no modo *dual-fuel*



Legenda: As siglas referem-se à: VA – válvula de admissão e VE – Válvula de exaustão
 Fonte: Adaptado de Karimi *et al.* (2022).

No contexto de inserção de combustíveis renováveis na matriz energética nacional, nota-se que tanto a adição de etanol à gasolina quanto à de biodiesel ao diesel vem aumentando ano após ano, e a tendência é que novos combustíveis renováveis sigam o mesmo caminho.

Neste contexto, pode-se destacar o HVO (*Hydrotreated Vegetable Oil*, do inglês), não apenas por suas boas propriedades de queima, mas por sua flexibilidade de rotas produtivas e adaptabilidade ao cenário brasileiro. O HVO apenas recentemente começou a ser estudado e suas propriedades de combustão e de associação a outros combustíveis não são totalmente conhecidas.

Segundo Aatola *et al.* (2008), o HVO, também chamado de diesel renovável, consiste de uma mistura de hidrocarbonetos parafínicos livres de enxofre, que possui alto número de cetano e um poder calorífico substancialmente maior que o do etanol,

sendo capaz de promover melhor eficiência aos motores de ignição por compressão quando comparado a misturas com etanol.

Dessa forma, a análise dos parâmetros relacionados ao desempenho, às características da combustão e às emissões de gases nocivos faz-se necessária, podendo permitir a avaliação do potencial dessa tecnologia inovadora e da sua viabilidade técnica e econômica para aplicações no mercado.

Grande parte dos trabalhos nesse seguimento utilizam técnicas experimentais, o que nem sempre é viável em termos de custo e demanda de tempo e, ainda, mão de obra para sua realização. Uma alternativa eficaz é aliar aos métodos experimentais as simulações computacionais.

As simulações computacionais, usando modelos matemáticos adequados, é uma abordagem econômica, pois os parâmetros do projeto do motor são alterados em um trabalho de simulação numérica, além das condições de injeções e tipos de misturas bicomcombustível.

Logo, aliar as simulações computacionais às técnicas experimentais é de grande relevância no desenvolvimento dessa tecnologia, pois visa a obtenção de potenciais vantagens e limitações a partir das diferentes manipulações possíveis de serem feitas com o auxílio de simulações, podendo então direcionar futuros experimentos.

1.1 Justificativa e Motivação

Dessa forma, considerando a contextualização apresentada e buscando-se aliar fatores econômicos, ambientais, sustentáveis e tecnológicos, pesquisas relacionadas à motores de combustão interna que utilizam combustíveis provenientes de fontes renováveis, tanto no modo *single* ou *dual-fuel*, são justificáveis e de grande relevância. A grande maioria dos trabalhos relacionados ao tema focam-se apenas em análises experimentais. No entanto, considerar análises computacionais também se justificam devido ao avanço computacional e dos *softwares* nos últimos anos. Nesse viés, o Laboratório de Máquinas Térmicas (LMT) da UNIFEI através do Grupo de Estudos em Tecnologias de Conversão de Energia (GETEC), desenvolveu ao longo dos últimos dois anos (2021 e 2022) pesquisas experimentais e computacionais em motores de combustão interna de ignição por compressão empregando combustíveis de fontes renováveis nos modos *single* e *dual-fuel* no projeto de

pesquisa do ROTA 2030 sob o processo de número 27192*5 e intitulado “Estudo experimental da tecnologia *dual-fuel* em motores de ignição por compressão utilizando diesel renovável (HVO/Farnesano) com etanol, hidrogênio ou biogás”. Sendo esta dissertação um fruto das pesquisas realizadas nesse projeto na parte concomitante à utilização de diesel fóssil e HVO como combustível primário nos modos *single* e *dual-fuel*, e biogás como combustível secundário no modo *dual-fuel*. A situação desse projeto pode ser conferida através do link:

<https://rota2030.fundep.ufmg.br/linha5/projetos/8-2/>

1.2 Objetivo Geral

Este trabalho tem como objetivo geral analisar, através de simulações computacionais, as características de desempenho de um motor de combustão interna no modo *single-fuel* operando com diesel e com HVO e com a tecnologia *dual-fuel* para a mistura HVO-Biogás, bem como suas emissões de poluentes.

1.3 Objetivos Específicos

Como objetivos específicos, podem ser elencados:

- Selecionar os combustíveis a serem estudados, bem como sua forma de admissão/injeção;
- Simular os cenários individualmente em software de análise CFD;
- Utilizar dados experimentais para as condições iniciais e para validação;
- Obter resultados numéricos preliminares para as configurações escolhidas;
- Simular a combustão *dual-fuel* de HVO com biogás;
- Utilizar os resultados obtidos para nortear escolhas para futuras análises experimentais.

1.4 Estrutura do Trabalho

Este trabalho é estruturado da seguinte forma:

No Capítulo 2 é feita uma revisão bibliográfica acerca do emprego da simulação computacional na análise de motores de combustão interna, e da combustão *dual-fuel* em MCI por compressão, destacando o uso do HVO e do biogás.

O Capítulo 3 apresenta os principais fundamentos da teoria dos motores de combustão interna de ciclo Diesel, bem como seus processos de combustão, os combustíveis empregados na realização desse trabalho e uma análise de emissões.

Por sua vez, no Capítulo 4 é apresentado um embasamento teórico para a realização das simulações desenvolvidas nesse trabalho, empregando o módulo Forte presente no software ANSYS.

Já no Capítulo 5, são apresentados os resultados obtidos durante o desenvolvimento deste trabalho, bem como a discussão dos mesmos.

Finalmente, no Capítulo 6, são apresentadas as conclusões gerais em relação ao trabalho desenvolvido, e sugeridos alguns temas, modificações e melhorias para serem desenvolvidos em trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A preocupação com questões energéticas e relacionadas ao meio ambiente são fundamentais e estão em discussão na atualidade. Pelos motores de combustão interna utilizarem combustíveis não renováveis e que geram alta taxa de geração de poluentes, observa-se a crescente preocupação da indústria automobilística em se reinventar e se preocupar com o desenvolvimento de tecnologias que alinhem a manutenção da eficiência de seus motores à redução dessas taxas de eliminação de poluentes na atmosfera.

Com o desenvolvimento da computação ao longo dos anos, cada vez mais é possível simular situações quase reais obtendo resultados confiáveis através de modelos que descrevem os problemas analisados com baixo custo. Não seria diferente na área automobilística, que utiliza esse recurso para otimizar seus projetos na busca de melhor eficiência e redução de poluentes, seja aplicando-o em tecnologias já existentes como no desenvolvimento de novas tecnologias, como a *dual-fuel*.

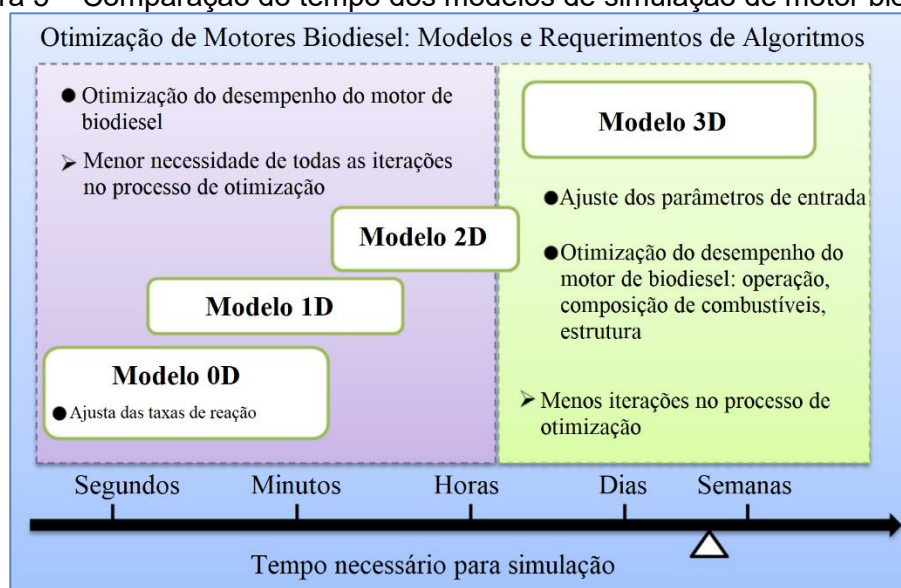
Merker *et al.* (2012) classificam a modelagem de um motor de combustão interna em três modelos, que se diferenciam entre si pelo modo como é feita a discretização da câmara de combustão. São eles:

- Zero-dimensional: também é chamado de análise termodinâmica e utiliza correlações empíricas para modelar a transferência de calor. A única variável independente é o tempo e não se considera turbulência, fração de gases queimados ou outros resíduos.
- Quasi-dimensional: também chamado de fenomenológico, discretiza o fenômeno da combustão em duas zonas, a região de gases queimados e a não queimados e a frente de chama em lâminas. Utiliza apenas equações diferenciais em função do tempo (única variável independente).
- Multi-dimensional: modelo mais complexo, que utiliza as Equações de Conservação da Massa, de Energia, de Quantidade de Movimento e do Impulso para modelar a combustão. Prediz a turbulência e a frente de chama com EDPs (equações diferenciais parciais) em função do tempo e do espaço. Além disso, prediz as espécies químicas, liberadas após o processo de combustão (homogêneo ou não), através da cinética química.

Como esperado, dentre os três modelos apresentados, o multi-dimensional é o mais completo e o que possui maior custo computacional, haja visto que é o modelo que possui maior riqueza de informações sobre o processo de combustão (MERKER *et al.*, 2012).

A Figura 5 apresenta um diagrama que compara o tempo de simulação dos modelos 0-D, 1D, 2D e 3D utilizados para otimização de um motor à biodiesel, sendo que o triângulo presente na figura indica o tempo de simulação do modelo 3D no software KIVA4-Chemkin para o motor a biodiesel. (WEI *et al.*, 2021).

Figura 5 – Comparação do tempo dos modelos de simulação de motor biodiesel



Fonte: Adaptado de Wei *et al.* (2021).

Um compilado de diversos trabalhos que consideram esses modelos é descrito por Sánchez, Velasco e Guerrero (2013) em relação aos motores de combustão interna de ciclo Diesel.

Muitos softwares comerciais, comumente utilizados para simulação computacional da dinâmica dos fluidos, como ANSYS e STAR-CD, já possuem módulos próprios voltados exclusivamente para simulação e análise de motores de combustão interna, como o módulo Forte presente na plataforma ANSYS. Há também softwares, ou pacotes, voltados apenas para esse campo de estudo, como o CONVERGE, o AVL BOOST, KIVA e o DIESEL-RK. Há também softwares livres, como o OpenFOAM, que são empregados para simulações do gênero.

Considerando a combustão *dual-fuel*, o processo de modelagem é bastante complexo, haja visto que inclui um fluido a mais. Isso se torna um desafio maior quando esse fluido secundário é um líquido, pois trata-se de uma combustão pré-

misturada em duas fases. Dessa forma, a simulação computacional é de extrema importância, pois aborda uma gama de questões práticas, difíceis de serem testadas experimentalmente, como obter o máximo benefício da técnica *dual-fuel*, coeficientes de excesso de ar, parâmetros de injeção de líquido e parâmetros de medição gasosa etc. (MATTARELLI, RINALDINI e GOLOVITCHEV, 2012).

São apresentadas nas seções seguintes breves resumos de alguns estudos relacionados à utilização da tecnologia *dual-fuel* em motores de ciclo Diesel, dando ênfase nos estudos empregando simulação computacional.

2.1 Combustão *Dual-Fuel*

Rakopoulos *et al.* (2008) aplicaram um modelo de multi-zonas para análises do ciclo fechado de um motor diesel modelo Ricardo/Cussons 'Hydra' de um cilindro, de alta rotação, injeção direta, motor naturalmente aspirado do tipo automotivo utilizando misturas diesel-etanol em 15% (DE15) a fim de analisar as emissões geradas pelo processo de combustão bicomcombustível, bem como sua performance. O modelo matemático utilizado pelos autores é bidimensional, com diversas equações que considera os efeitos físicos e químicos; como as equações clássicas de conservação, modelos de evaporação de gotículas e mistura de jato, esquemas de equilíbrio químico das espécies consideradas e equações para predição das emissões de óxido nítrico e formação de fuligem. As equações do modelo utilizado foram resolvidas numericamente, em uma rotina computacional escrita no Fortran IV, utilizando a técnica de marcha no tempo, sendo as equações diferenciais discretizadas por um esquema simples de Euler. Os resultados foram obtidos considerando 75% e 38% de carga total do motor e comparados com resultados experimentais para a variação da pressão no cilindro e a taxa de perda de calor para o diesel puro e a mistura DE15 em função do ângulo do virabrequim. As concentrações de óxido nítrico e de fuligem na exaustão também foram obtidas e comparadas experimentalmente. Além disso, gráficos na forma de iso-contornos para razão de equivalência, temperatura, concentração de óxido nítrico e densidade de fuligem dentro do cilindro em vários instantes de tempo são apresentados. Notou-se que a análise numérica obteve resultados que se comparam bem com as medições obtidas por uma investigação experimental. Além disso, através dos iso-contornos foram obtidas informações úteis para o spray de combustível de diesel puro e da mistura com etanol, com relação ao

mecanismo de combustão e a formação de NO e Soot. Finalmente, os autores consideram que o modelo apresentado é uma ferramenta útil, de baixo custo computacional, que pode auxiliar no desenvolvimento de motores mais eficientes com a utilização de biocombustíveis em motores de combustão.

Kokjohn *et al.* (2010) apresentaram detalhadamente resultados obtidos através da modelagem CFD multidimensional e com dados experimentais um motor de combustão de baixa temperatura (LTC) utilizando três diferentes motores (Cummins N14, Scania D12 e CAT SCOTE) e combustíveis/misturas: diesel, etanol, diesel-gasolina e etanol-diesel. Nesse intuito, os autores utilizaram o software KIVA-3V acoplado ao CHEMKIN II solver para realizar cálculos químicos detalhados, utilizando 49 espécies e 179 mecanismos de reação que descrevem a oxidação do iso-octano, n-heptano e etanol necessários para simular a gasolina, o óleo diesel e o etanol, respectivamente. Para predição da formação de fuligens os autores utilizaram um modelo fenomenológico de fuligem baseado na abordagem de Hiroyasu e, para as emissões de NO_x, utilizaram um mecanismo reduzido de NO que consiste em 4 espécies adicionais e 12 reações. Foram apresentados resultados numéricos para a pressão no cilindro e a taxa de perda de calor variando com o ângulo do virabrequim, esses resultados foram comparados com resultados experimentais considerando diversas combinações de combustíveis. Os autores concluíram que a abordagem de modelagem utilizada foi capaz de capturar as características de injeção, ignição e combustão (através das curvas de pressão no cilindro e taxa de liberação de calor), bem como as mudanças relacionadas à alteração da composição do combustível. Em suma, concluiu-se que as simulações mostraram fornecer previsões precisas das diferenças nas características de combustão do óleo diesel, etanol e misturas de gasolina e etanol com óleo diesel.

Gharehghani, Mirsalim e Jazayeri (2012) consideraram a investigação numérica e experimental de um MCI a ciclo Diesel, para serviços pesados, de 12 cilindros e fabricado pela DESA Company, operando em regime *dual-fuel* com gás natural e com rotação de 1500 rpm. Foi considerado o modelo de combustão parcialmente agitada e um mecanismo reduzido de cinética química contendo 79 espécies e 294 reações para prever a oxidação de combustíveis e detonação. Esses modelos foram adicionados ao software multidimensional KIVA-3V para simular os efeitos da turbulência e as interações dos combustíveis nesse motor. Comparou-se a pressão no cilindro e a taxa de perda de calor normalizada obtidas pela simulação e

pelo experimento. Além disso, padrões de fluxo de injeção obtidos pela simulação e da visualização experimental foram comparados. Mapas de contorno para variações de temperatura e fração mássica de NOx durante o processo de combustão foram obtidas pelas simulações considerando diferentes ângulos do virabrequim após o ponto morto superior (2° a 20°). Frações molares de metil, metano e metanal também foram obtidas. Verificou-se que há uma boa concordância entre os resultados simulados com os experimentais. Notou-se também que o aumento da temperatura e da pressão de admissão, reduz a quantidade de perda de energia, porém esse aumento pode levar ao início de detonação e danos ao motor. E, por fim, que a formação de NOx aumenta com a temperatura durante a combustão, além de a fração mássica de metano reduzir-se enquanto a combustão prossegue.

Maghbouli *et al.* (2013) analisaram as características de combustão e emissões de um motor diesel *dual-fuel* 4 tempos de 6 cilindros. Para isso, eles utilizaram uma combinação de um código de simulação de fluxo e modelos químicos detalhados, nos softwares KIVA e CHEMKIN, tendo sido criadas três tipos de malhas computacionais desenvolvidas no ICEM/ANSYS e considerados três casos: diesel puro (100:0), DF (12:88) e DF (9:91). Foi apresentado um teste de malha para a pressão no cilindro em função do ângulo do virabrequim. A pressão no cilindro (validada experimentalmente), as taxas brutas de perda de calor e as concentrações de CO, CO₂ e NOx em função do ângulo do virabrequim foram obtidas para os três casos, bem como a pressão no cilindro, a taxa de perda de calor, a pressão média efetiva indicada e as concentrações de CO e NOx, considerando diferentes taxas de combustível piloto considerando apenas o caso 2. Baseado nos resultados obtidos, os autores concluíram que as curvas de pressão no cilindro estão de acordo com os resultados experimentais, a ignição atrasa ao utilizar o modo DF, e que o incremento na quantidade de combustível piloto reduz o atraso de ignição, eleva pressão de pico no cilindro, provoca um consumo mais rápido de metano e aumentam a pressão média efetiva e as concentrações de NOx e CO.

Mattarelli, Rinaldini e Golovitchev (2014) analisaram através da dinâmica dos fluidos computacional o processo de combustão de um motor diesel HSDI turboalimentado 2,8 L de 4 cilindros da VM Motori, operando nos modos Diesel e DF (diesel-gás natural) a fim de otimização o seu desempenho e obter o máximo de vantagem da técnica bicomcombustível e reduzir as emissões de poluentes. Assim, a partir de um modelo de combustão para o diesel previamente validado, adicionou-se um

modelo de combustão a gás natural para simular o processo de ignição e combustão em um motor *dual-fuel* implementados no código KIVA-3V e KIVA-4 juntamente com submodelos para turbulência, evaporação, propagação de chama etc. As simulações foram validadas experimentalmente com a pressão no cilindro, taxa de liberação de calor e emissões de CO e NO considerando apenas a utilização de diesel em diferentes rotações do motor com carga total. Para a operação DF, foram obtidos gráficos de contorno para a pressão média efetiva em dois ângulos, antes e depois do ponto morto superior, em função do ângulo de início de injeção, e razão de combustível. Ademais, os autores obtiveram, e compararam com a operação apenas a diesel, as curvas de pressão e temperatura no cilindro, taxa de perda de calor e emissões de CO₂, CO e NO. Todos esses resultados foram obtidos com o motor funcionando a 2000, 3000 e 4000 rpm. Pode-se obter uma configuração ótima que permitiu que o motor em operação DF fornecesse a mesma potência com operação apenas com Diesel, mantendo-se a mesma pressão no cilindro. Observou-se também que a inserção de gás natural no processo DF, além de eliminar a fumaça, permite também a redução das emissões de CO₂ e CO, porém traz como desvantagem o aumento do NO. Os autores concluem que esta nova configuração deve reduzir ligeiramente, mas não cancelar, as vantagens em termos de economia de combustível e redução de emissões.

Sodré *et al.* (2014) estudaram os efeitos da adição de etanol anidro em motores diesel a fim de reduzir as emissões de gases poluentes. Nesse contexto, os autores desenvolveram um modelo matemático no Software *Engineering Equation Solver* (EES) capaz de calcular as propriedades do combustível e do ar e características do ciclo termodinâmico do motor considerando injeção direta e indireta de etanol na câmara de combustão. Obteve-se as variações da pressão e da temperatura no cilindro em função da razão de equivalência da mistura ar/combustível, da taxa de compressão, da porcentagem de etanol injetado diretamente e da porcentagem de etanol injetado indiretamente. Também foram obtidas as curvas de CO, CO₂, H₂O, N₂ e O₂ em função da porcentagem de injeção de etanol, de forma direta e indireta. Os resultados obtidos pela simulação mostraram que a injeção direta de etanol na câmara de combustão é uma técnica mais vantajosa do que a injeção indireta de etanol no sistema de admissão, mesmo aumentando o consumo de combustível. Por fim, os autores concluíram que o uso de etanol reduz as emissões CO e NO_x.

Praptijanto, Muharam e Putrasari (2015) verificaram, em seu artigo, como a adição de etanol em um motor diesel pode ocasionar variações no desempenho e nas emissões de escapamento desse motor. Para tal, eles consideraram a AVL Boost, que é uma ferramenta de simulação de motor virtual com as características do motor de quatro tempos e dois cilindros Fujikawa 295D variando a sua velocidade de rotação (1000 a 1500 rpm). As curvas para potência de freio do motor em função da velocidade de rotação e da taxa de liberação de calor em função do ângulo do virabrequim foram obtidas considerando diesel puro e quatro porcentagens de adição de etanol e, também, comparadas com resultados experimentais. Ademais, as curvas para variação de emissões de CO, NOx e fuligem em função da velocidade de rotação do motor também foram apresentadas. Os autores perceberam que a taxa de liberação de calor fica menor conforme reduz-se a quantidade de etanol e, por outro lado, as emissões de CO, fuligem e NOx tornam-se maiores conforme a porcentagem de etanol na mistura é menor.

Aydin e Sorousbay (2015) simularam a combustão *dual-fuel* em um motor de ignição por compressão no intuito de verificar sua performance e emissões de poluentes utilizando diferentes velocidades de rotação e, também utilizando diferentes razões de excesso de ar. Para tal, foi simulado um motor diesel Ford, considerando apenas um cilindro para os cálculos, cujo domínio computacional foi construído no código AVL FIRE. Foi obtida, e validada experimentalmente, a variação da pressão no cilindro e, posteriormente, a variação da pressão no cilindro e da taxa de perda de calor, todos em função do ângulo do virabrequim apenas para o motor com diesel e para o motor a 1780 rpm. Em seguida, a performance do motor e suas emissões, foram obtidas considerando a variação da sua velocidade de rotação (para o diesel puro e *dual-fuel*) e do coeficiente de excesso de ar. A partir dos resultados, foi notada a capacidade de reduzir as emissões de NO, enquanto mantém a potência do motor e os valores de consumo de combustível específicos comparáveis ao motor a diesel básico. Além disso, nas condições de simulação do trabalho, verificou-se que para uma razão de excesso de ar igual a dois houve redução na potência e aumento do consumo específico de combustível, em comparação com o motor básico.

Tutak e Szwaja (2015) consideraram o estudo através de simulação computacional de um motor diesel *dual-fuel* movido a metanol e diesel a fim de verificar seu comportamento termodinâmico e seus níveis de emissões. Nesse sentido, os autores consideraram três casos: diesel puro, 20% e 50% de metanol com

velocidade constante de 1500 rpm sendo a turbulência modelada pelo modelo $k-\zeta-f$ e a combustão pelo modelo *Extended Coherent Flame Model*. Os autores compararam as curvas simuladas para taxa de perda de calor, calor perdido acumulado e emissão de NO para os três casos de combustíveis considerados. Além disso, mostraram a variação da pressão no cilindro considerando casos distintos de tempo de ignição. Como conclusão, os autores notaram que a adição de metanol provoca aumento da pressão de pico e das emissões de NO, porém reduz o processo de combustão e a formação de fuligem.

Yousefi *et al.* (2015) analisaram com recurso CFD multi-dimensional o desempenho e as emissões em um motor de combustão interna de ciclo diesel operando com misturas DF gás natural/diesel, hidrogênio/diesel e metanol/diesel. Para atingir os objetivos do estudo, foi considerado um modelo 3D (incluindo as leis básicas de conservação e o modelo de turbulência RNG $k-\varepsilon$) com cinéticas químicas (AVL FIRE-CHEMKIN) e um motor monocilindro e quatro tempos com dois modos distintos de operação. Os resultados obtidos mostram as variações da pressão no cilindro e da taxa de perda de calor, os contornos de temperatura no cilindro, pontos de máxima eficiência e as emissões das diferentes combinações de combustíveis. No geral, os autores concluíram que a combustão de hidrogênio/diesel mostra melhor desempenho e eficiência e emissões reduzidas com menos condições de mistura de combustível, mas a mistura metanol/diesel tem melhor desempenho em termos de desempenho do motor e redução de emissões em condições de mistura rica.

Datta e Mandal (2016) estudaram os efeitos das misturas diesel-etanol e diesel-metanol nas características de desempenho, combustão e emissão de um motor de combustão interna variando-se os percentuais desses álcoois, de 0% a 15%, para cada mistura bi combustível. Para tal, os autores utilizaram o software comercial Diesel-RK para realizar as simulações computacionais de injeção direta das diferentes combinações de fluidos em um motor Kirloskar modelo TV1, monocilindro e quatro tempos, mantendo-se constantes a velocidade de rotação, em 1500 rpm, e o tempo de injeção estática, em 23°BTDC. Foi feita a validação dos resultados simulados pelo software com resultados obtidos experimentalmente utilizando apenas óleo diesel mineral. Foram obtidas as curvas, em função da potência ao freio, para: a eficiência térmica ao freio (BTE), o consumo de combustível específico ao freio (BSFC), a temperatura do gás de exaustão (EGT), o atraso (retardo) na ignição e as emissões de CO₂, NO_x, material particulado e fumaça considerando diesel puro e as misturas

bi combustíveis em diferentes proporções. Além disso, as curvas da variação da pressão no cilindro e da taxa de liberação de calor, ambas em função do ângulo do virabrequim, também foram obtidas. A partir dos resultados obtidos, verificou-se que tanto a adição de etanol quanto a de metanol ao diesel aumentam a eficiência de combustão, o retardo de ignição e a taxa de liberação de calor e reduziram o pico de pressão no cilindro. Além disso, verificou-se também a redução nas emissões de NO_x (maior redução na mistura diesel-etanol) e de materiais particulados e fumaça (ambos com maior redução na mistura diesel-metanol).

Hanafi *et al.* (2016) investigaram as características de desempenho, combustão e emissão de um MCI por compressão alimentado com misturas diesel-etanol. Para a solução do problema, considerou-se um modelo 1D de um motor monocilíndrico 4 tempos, em sistemas de admissão e exaustão, cilindro, cabeçote, válvulas e geometrias de porta, simulado em um software comercial clássico para simulações afins, variando-se a velocidade de rotação. A eficiência do motor foi obtida analisando-se as curvas de eficiência volumétrica, torque do motor a freio, potência de freio, pressão efetiva média de freio, consumo específico de combustível de freio e eficiência térmica de freio. Já as emissões foram analisadas considerando as curvas de monóxido de carbono e hidrocarbonetos não queimados. Baseando-se nos resultados obtidos, os autores concluíram que a utilização da combustão *dual-fuel* diesel/etanol apresenta bom resultado em termos de desempenho e emissão para motores trabalhando em baixa rotação, mas não em alta rotação.

Jamali e Nalim (2016) estudaram computacionalmente a utilização do metano puro em motor de ignição por compressão, motor diesel modelo CAT3401, utilizado em serviço pesado, a fim de verificar seu potencial para redução de emissão de poluentes de forma a manter sua alta eficiência. Para tal, os autores utilizaram simulação multidimensional com o código CONVERGE versão 2.1, que utiliza o método dos Volumes Finitos para discretização das EDPs que modelam o problema, sendo a modelagem da turbulência feita pelo modelo RANS (k- ϵ). Além disso, os autores acoplaram ao código CFD o *solver* SAGE CHEMICAL para resolver as equações da cinética química. Foram apresentados resultados para a pressão no cilindro e para a taxa de liberação de calor considerando a convergência da malha computacional utilizada, bem como o custo computacional em cada caso. Os autores também apresentaram resultados para as emissões de hidrocarbonetos (HC) e óxidos de nitrogênio (NO_x) considerando misturas de diesel puro e substituição de 50% e

75% de gás natural, sendo estes resultados comparados com resultados experimentais. Considerando ainda as taxas de substituição de gás natural, os autores apresentaram e compararam seus resultados experimentalmente para a pressão no cilindro e para a taxa de liberação de calor. Verificaram também que o modelo utilizado nas simulações concorda de forma satisfatória com os dados obtidos experimentalmente, porém subestima ligeiramente a última fase da combustão. Concluíram também que a emissão de HC é um dos principais desafios, pois grande parte do metano sofreu queima em condições de operação do motor em carga parcial. Porém, as emissões de NOx reduziram-se de forma significativa.

Simsek *et al.* (2017) investigaram os parâmetros de funcionamento de um motor de ignição por compressão utilizando a tecnologia *dual-fuel* com três tipos de álcoois: butanol, propanol e metanol. Para isto, foi utilizado o software Diesel-RK e um motor de 4 tempos de cilindro único e porcentagens de 5, 10 e 15% de cada álcool com diesel em uma mistura bicomcombustível e três diferentes rotações (2400, 2800 e 3200 rpm). Obteve-se as curvas de potência e torque do motor, consumo de combustível para cada combustível e suas misturas duais nas três rotações. Obteve-se também o atraso de ignição, a duração da combustão e os efeitos do fluido nas porcentagens dos álcoois com diesel. A partir dos resultados obtidos, a adição dos álcoois reduz de forma mínima a potência do motor e aumentam o consumo de combustível. Por fim, verificou-se que o aumento da fração de butanol, propanol e metanol aumentaram tanto o atraso de ignição, quanto o tempo de combustão.

Elzahaby *et al.* (2018) consideraram o processo de combustão em um motor de ignição por compressão de carga pré-misturada (PCCI) utilizando diferentes proporções da combinação *dual-fuel*, no caso, diesel-etanol a fim de investigar numérica e experimentalmente os efeitos da adição de etanol em motores PCCI. Nesse sentido, os autores utilizaram uma bancada experimental equipada com um motor diesel comercial monocilíndrico de 4 tempos em sua rotação nominal (1500 rpm). Já na parte relativa à simulação, utilizaram um modelo de zona única para prever a combustão PCCI e o software Chemkin-Pro. Os resultados apresentados mostram a variação da temperatura e da pressão no cilindro, bem como os picos de pressão e de temperatura considerando diversas porcentagens de álcool na mistura *dual-fuel*. Além disso, também foram plotadas as curvas relativas às emissões de gases nocivos (NOx, CO e HC) considerando diesel puro e três porcentagens de adição de etanol. Os autores concluíram que na combustão PCCI, o aumento de etanol na mistura

bicombustível reduz a pressão no cilindro e a temperatura máxima, bem como as emissões de CO e HC, além de atrasar a ignição automática e a combustão, mas, por outro lado, o tempo de combustão é aumentado.

No trabalho de Taib *et al.* (2018), estudou-se, por meio de simulações computacionais, as características de combustão do diesel puro e das misturas diesel-etanol-éster metílico de palma (D-E-PME) a fim de estimar a melhor composição que pode ser usada em aplicações reais de motores. Os autores utilizaram o CONVERGE CFD e como base o motor de ignição por compressão Yanmar TF90 operando a 1600 rpm. Foram consideradas sete diferentes misturas mantendo-se 50% de óleo diesel e variando as quantidades de etanol e éster metílico de palma de 10 a 40%, a cinética de reação química para as misturas foi obtida na *Lawrence Livermore National Library* e modelos de combustão, injeção e turbulência foram configurados para cada mistura, porém os autores não especificam quais. Obteve-se as curvas para a taxa de liberação de calor, os perfis de temperatura no cilindro e a transferência de calor cumulativa em função do ângulo do virabrequim para todas as misturas consideradas e, também, para o diesel puro. Dos resultados obtidos, foi possível verificar que a mistura de diesel com etanol e PME melhora as características de combustão e a qualidade de ignição e aumenta a taxa de liberação de calor durante a combustão. Verificou-se também que o retardo de ignição das misturas com maior porcentagem de PME é menor do que as outras misturas, mas com um intervalo de tempo maior do que o óleo diesel, o que mostra que as misturas com 15% de PME, ou superior, liberaram mais energia, melhorando a eficiência do motor. Contudo, as misturas com menos de 15% de PME não conseguiram completar a ignição. Em suma, os autores concluíram que o motor Yanmar TF90 com ignição por injeção direta é capaz de funcionar apenas com porcentagens igual ou acima de 15% de PME para evitar qualquer modificação do motor.

Tutak *et al.* (2018) investigaram através da CFD motores de combustão interna de ignição por compressão de três cilindros movidos a alto teor de bioetanol. Para tal, os autores consideraram o código CFD AVL FIRE com o algoritmo SIMPLE para acoplamento de pressão-velocidade, para prever a turbulência empregaram o modelo $k-\xi-f$ e para modelar o processo de combustão utilizaram o modelo ECFM-3Z. As curvas para variação da pressão no cilindro e para taxa de perda de calor variando com o ângulo do virabrequim foram apresentadas para o diesel puro e para DF variando o tempo de ignição. Além disso, a variação de IMEP e ITE com o ângulo de

injeção do diesel foram apresentadas, bem como as taxas de emissões de NO e fuligem. Com base nos resultados, os autores verificaram que no modo DF, a frente de chama se propaga com uma velocidade maior e o início da combustão começa em um local diferente da câmara de combustão do que no modo clássico. Além disso, observou-se redução das emissões de fuligem, mas aumento nas emissões de NO.

A utilização da amônia na tecnologia *dual-fuel* em motores de combustão interna de ciclo Diesel foi estudada através de simulações computacionais por Lasocki, Bednarski e Sikora (2019) com o objetivo de verificar seu potencial e viabilidade nessa tecnologia, haja visto que sua combustão direta não resulta em emissão de dióxido de carbono e pode ser produzido a partir de fontes renováveis. Utilizou-se nesse estudo um modelo numérico unidimensional, desenvolvido no software AVL BOOST, com as especificações do motor Perkins 1104C-E44T para três modos de abastecimento, caracterizados por diferentes combinações de taxas de fluxo de amônia-diesel. A taxa de liberação de calor foi modelada pela função *Wibe* bifásica. Nas simulações, considerou-se o motor com rotação constante de 1400 rpm. Os autores validaram suas simulações, para o caso onde o motor funciona apenas com óleo diesel. Obteve-se as curvas para a intensidade do fluxo de combustível, o consumo específico de combustível ao freio, a potência do motor e a concentração de poluentes (CO₂, CO, NO) em função da carga máxima do motor quando usando apenas óleo diesel para o caso sem amônia e com variação nas vazões de amônia e óleo diesel. A utilização de amônia resulta em redução significativa das emissões de CO₂ e CO, porém reduz sua eficiência, devido ao baixo valor de aquecimento da amônia. Diferentes proporções de diesel-amônia podem ser usadas para obter potência máxima do motor. A maior diferença na emissão de NO depende do modo de operação do motor. Por fim, os autores concluem que o modelo proposto foi verificado positivamente e que o trabalho é útil para o desenvolvimento de algoritmos de controle de motores bicomcombustível.

Erdiwansyah *et al.* (2019) estudaram, através de simulações, o desempenho de um motor diesel monocilíndrico com diferentes tamanhos da câmara de combustão e de injeção de combustível DF diesel-metanol. Para tal, os autores utilizaram o software GT-Power e consideraram o motor diesel, 4 tempos, monocilindro modelo TF120M fabricado pela Yanmar a 1000 e 2000 rpm. As curvas para pressão no cilindro, fluxo de calor e fração de queima de combustível em função do ângulo do virabrequim e o diagrama P-V do ciclo termodinâmico foram apresentados. A partir

das simulações, que foram comparados com dados experimentais, os autores concluíram que há uma boa correlação entre si, sendo o GT-Power capaz de validar com sucesso todos os parâmetros termodinâmicos do motor.

De Robbio, Cameretti e Tuccillo (2020) estudaram, através de simulações computacionais, a tecnologia *dual-fuel* em um motor de combustão interna por compressão utilizando misturas de gás natural e óleo diesel. Para tal, os autores propuseram uma abordagem avançada, introduzindo 5 novas espécies e 9 reações para a autoignição do metano, capaz de prever a ignição do metano em motores diesel dual-fuel entre 1000 K e 2000 K e entre 1 bar e 150 bar. No trabalho, foi empregado o código multidimensional KIVA-3V solver juntamente com esse mecanismo de cinética química para o atraso de autoignição do metano. A geometria inclui locais de válvula aberta, dutos de admissão e exaustão, com malha estruturada em blocos com 104.000 células construída pelo ANSYS/ICEM, além de contemplar um modelo de combustão global 18 espécies químicas e 12 reações. Os autores apresentaram diversos resultados numéricos (como a pressão no interior do cilindro, a distribuição de temperatura média no interior do cilindro e o atraso de ignição com o ângulo do virabrequim) que foram comparados com resultados experimentais, considerando diferentes porcentagens de entrada de energia fornecida pelo metano. Apresentaram também os resultados de variações entre a utilização do modelo de autoignição e o modelo de *2-steps* e as formações de NO, em ppm. Os autores concluíram que os resultados numéricos para valores menores de razão pré-misturada obtidos com o uso do mecanismo de autoignição demonstraram boa concordância com os experimentais. Por último, simularam o caso final com fornecimento de energia por metano de 80% para verificar o comportamento do modelo em condições de operação mais próximas das experimentais. Além disso, notaram também que as melhorias na modelagem da combustão *dual-fuel* foram obtidas ao se implementar um mecanismo mais detalhado para a descrição do processo de combustão. Verificou-se também que para os três casos caracterizados com menor valor de RP (maior quantidade de metano) induziu-se à formação crescente de óxidos nítricos.

2.2 Combustão *Dual-Fuel* com HVO

Como mencionado no Capítulo 1, o óleo vegetal hidrogenado, do inglês *Hydrotreated Vegetable Oil* (HVO), representa uma potencial aplicação nos MCI no

cenário nacional. Diversos autores analisaram suas características em processos *dual-fuel*, como citados a seguir alguns desses trabalhos e suas principais contribuições

Aatola *et al.* (2008) analisam as emissões de poluentes e o consumo específico de combustível (SFC) de um motor de grande porte alimentado com diesel puro, HVO puro e mistura *dual-fuel* HVO-diesel com 30% HVO utilizando diferentes tempos de injeção. Para tal, foram realizados experimentos em um motor de 4 tempos de 6 cilindros com potência nominal de 225 kW e velocidade de 2200 rpm, em regime permanente e considerando três velocidades de rotação e cargas de 50% e 100% na nominal, com os fluidos a 35°C. Obteve-se as curvas de emissões de CO, HC, NOx e fumaça, bem como o consumo específico de combustível para os casos mencionados anteriormente, sendo comparados entre si os três tipos de combustíveis utilizados. Os autores puderam concluir que houve reduções nas emissões dos poluentes medidos e no consumo de combustível utilizando-se HVO, podendo ser mais elevadas ao se otimizar os parâmetros de injeção de HVO, porém sem a necessidade de mudanças nas características do motor, evidenciando sua aplicação em frotas veiculares, como em ônibus urbanos e/ou veículos de mineração.

Pirjola *et al.* (2017) realizaram um estudo experimental em um motor de um trator, em condições reais e em um dinamômetro, empregando diesel, de baixo teor de enxofre, e HVO a fim de verificar e comparar os níveis de emissões para ambos os combustíveis e em ambas as condições de testes. Para tal, foi considerado nos testes um motor Agco Power 44 AWI de 99 kW e quatro cilindros e realizados testes estacionários e transientes. Testes reais foram feitos em uma estrada comum de asfalto de baixo tráfego, na Finlândia, em diferentes elevações e cargas, mas mantendo velocidade aproximadamente constante. Por sua vez, os testes em laboratório foram feitos em um dinamômetro Schenk WT 400. Os autores apresentaram concentrações normalizadas de partículas maiores que 2,5 nm e 7 nm para ambos os combustíveis. Apresentaram também a variação transiente de material particulado e NOx para a condição real e para o dinamômetro. A partir dos testes realizados, concluiu-se que as emissões com HVO foram menores do que com diesel, mas ambos possuindo picos durante conduções em subidas e descidas na estrada, o que não foi observado nos testes com o dinamômetro. Além disso, do teste estacionário constatou-se que as emissões de NOx são semelhantes para ambos os

combustíveis. De modo geral, verificou-se que a formação de partículas é muito sensível à condução do veículo.

Bohl *et al.* (2018) investigaram as características de *spray* e de combustão do HVO e suas misturas com diesel mineral, de padrão europeu, para aplicação em motores de serviços pesados. Os autores realizaram testes experimentais em um motor 4 tempos, de 4 cilindros e de injeção direta utilizando três métodos diferentes (sendo um para análise de *spray* e dois para análise de desempenho e emissões do motor, original e otimizada para uso de HVO) e misturas com 0, 10, 20, 50 e 100% de HVO. Foram obtidas as curvas para a penetração do *spray* de combustível, seu ângulo de cone e área/unidade de energia considerando diesel puro e sua mistura com 50% e 100% de HVO. Além disso, foram medidas as emissões de CO, NOx, THC e material particulado também para diesel puro e misturas com 10% e 20% de HVO, bem como curvas de análise de desempenho, como potência do motor, consumo de combustível, taxa de liberação de calor. A partir dos resultados obtidos, observou-se que o aumento da presença de HVO reduz a penetração do *spray* e aumento seu ângulo de cone, não causando perda de potência significativa, nem aumento no consumo de combustível e mantendo o perfil de liberação de calor similar. Por fim, conclui-se também que a otimização de injeção de combustível contribui para maior redução de emissões de NOx e material particulado juntamente com menor consumo de combustível.

Dimitriadis *et al.* (2018) estudaram as emissões em um motor diesel Euro 5 para serviços leves, em regime permanente e no Novo Ciclo de Condução Europeu (NEDC), utilizando HVO (NEXTBL) como combustível. Para tal, foram realizados experimentos no motor de 4 cilindros equipado com sistema common rail e com EGR, em três etapas: uma em regime permanente sob o mapa operacional do motor, uma sob o ciclo de condução NEDC e uma para diferentes posições da válvula EGR e diferentes tempos médios de injeção (MTI) em pontos específicos do estado estacionário. Foram apresentadas as curvas de variação de consumo de combustível e emissões de NOx, fuligem, CO, HC e CO₂ comparados com diesel convencional. Além disso, foram comparadas as eficiências térmicas para as etapas transiente e de análise EGR e MTI. Através do trabalho desenvolvido, notou-se que o HVO traz reduções nos níveis de fuligem, HC e CO. Notou-se também que retardar o tempo de injeção contribui para redução simultânea de NOx e fuligem para o HVO e que para o EGR a influência sobre as emissões é similar tanto para o diesel quanto para o HVO,

porém os autores recomendam mais estudos para se chegar à melhores conclusões sobre o efeito da EGR e do tempo de injeção.

Bortel, Vávra e Takáts (2019) conduziram experimentos em um motor de ignição por compressão monocilindro de um veículo de passeio utilizando óleo diesel puro, HVO puro e uma mistura de diesel com 30% de HVO a fim de verificar sua performance e suas emissões. Baseou-se os experimentos em um Ciclo Estacionário Harmonizado Mundial (WHSC) utilizando 13 modos de teste. Obteve-se a potência indicada do motor, o consumo específico de calor indicado, as emissões de CO₂, CO, HC, NO_x e fuligem médios e para cada teste, de modo individual e comparados com o diesel convencional. Dos resultados obtidos no experimento, os autores observaram que o uso de HVO causou um aumento na potência indicada e uma pequena melhora na eficiência do motor. Além disso, a utilização de HVO causou redução nas emissões globais de material particulado, CO e HC, mas com efeito pequeno para NO_x e fuligem.

Suarez-Bertoa *et al.* (2019) estudaram os gases de exaustão, regulamentada e não regulamentada, de dois carros de passeio utilizando diferentes misturas de HVO, diesel fóssil e diesel comercial (B7). Nesse intuito, os autores fizeram testes experimentais de um veículo em estradas reais (urbana, rural e autoestrada) às temperaturas e velocidade médias de 23°C e 49 km/h, respectivamente. Além disso, considerou-se também a -7°C para o caso experimental. Via de regra, concluiu-se que as diferentes misturas de HVO e diesel não ocasionaram problemas relacionados ao combustível de tendências nas emissões dos veículos testados no laboratório e na estrada. Além disso, pode-se notar que a redução de temperatura causou aumento das taxas de emissões.

Rimkus, Stravinskas e Matijošius (2020) analisaram, através de técnicas experimental e numérica, um MCI adaptado para funcionar de forma *dual-fuel* com diesel, HVO, gás natural e biogás. Os casos analisados foram para diesel e HVO puros e misturas nas proporções 40 e 60%, respectivamente para os combustíveis líquidos e gasosos. A parte experimental foi conduzida em um motor de injeção direta turboalimentada de 4 cilindros a 2000 rpm e 45 Nm de torque. Por sua vez, a análise numérica foi feita pelo software AVL-BOOST com os parâmetros gerais do motor usado na parte experimental. Foram obtidas as variações para o consumo de combustível, eficiência térmica, emissões de CO₂, CO, NO_x, HC e fumaça em função do ângulo de início de injeção. Ademais, fixando-se um ângulo de início de injeção

(AIO), foram obtidas as características/indicadores de combustão. Os autores concluíram que a substituição do diesel, ou HVO, puros reduz a eficiência térmica e aumenta o consumo de combustível (sendo muito maior quando se utiliza biogás), há aumento da concentração de CO₂ para o biogás e redução para o gás natural, aumento das emissões de CO para ambas as combinações *dual-fuel* e reduções nas emissões de fumaça e NO_x. Para todos os casos, notou-se a dependência com o AIO.

Shepel *et al.* (2021) estudaram o desempenho energético e ambiental de um motor de combustão interna em diversas cargas do motor e mesmo início de injeção para diferentes tipos de combustível e suas misturas, comparando-as com diesel puro. Para tal, utilizou-se cinco misturas diferentes à base de óleo vegetal hidrogenado e éster metílico de ácido graxo em um MCI de 4 tempos de 4 cilindros com 66 kW, 180 Nm e 4000 rpm de máxima potência, torque e velocidade angular, sendo os parâmetros de combustão das misturas analisados com o software AVL BOOST. As curvas para a taxa de liberação de calor, aumento da temperatura e da pressão no cilindro foram analisadas em função do ângulo do virabrequim. Além disso, obteve-se o comportamento do consumo de combustível, eficiência térmica, e emissões de poluentes em função da carga do motor, dada em termos de BMEP. Pode-se notar que as misturas de FE e HVO reduziram os valores de NO_x, HC, CO₂ e fumaça. Todavia, não houve reduções significativas para emissões de CO. Além disso, as misturas com maior teor de ácidos graxos liberaram mais NO_x, apresentando menor eficiência térmica que o HVO, além de possuírem tempo de combustão mais longo que para o diesel puro.

Sondors *et al.* (2021) investigaram experimentalmente os efeitos, de performance, emissões e aspectos econômicos, do uso de HVO em um carro de passeio típico. Para tal, consideraram um modelo de carro Opel Insignia 2.0 CDTi, um dinamômetro de chassi, modelo Mustang MD-1750, e equipamentos AVL para medição de consumo e de emissões. Obteve-se as curvas de torque e potência para diferentes rotações do motor, consumo de combustível (em termos de volume, massa e energia) e concentrações de CO₂, HC, SO₂ e NO_x. A partir do estudo conduzidos, os autores concluíram que: a potência e o torque do veículo, para ambos os combustíveis, são similares; houve aumento no consumo volumétrico, mas redução no consumo mássico e energético para o HVO, mostrando que sua combustão foi mais favorável; houve redução nas concentrações de CO₂, SO₂, NO_x e HC em relação ao diesel fóssil. Nesse contexto, pôde-se concluir que a utilização do HVO é

promissora e competitiva com o diesel fóssil, porém o seu preço é um fator relevante na sua adoção.

Dimitriadis (2021) investigou, em sua tese de doutorado, as melhorias de emissões e consumo de combustível que se pode obter através da recalibração (em termos de injeção, EGR) em um motor diesel turbocompressor com injeção direta utilizando HVO puro. Para tal, foram considerados experimentos em dois motores diesel leves, um Euro 4 e outro Euro 5, em regime permanente considerando o Novo Ciclo de Condução Europeu (NEDC). Além disso, foi construído um modelo de motor, calibrado e validado no experimento para o motor Euro 5 no software AVL BOOST, a fim de identificar um conjunto de configurações mais adequadas para o melhor aproveitamento das propriedades do HVO. Dentre a grande quantidade de resultados e discussões apresentados pelo autor, o mesmo destaca que: comparando-se o HVO com o diesel comercial, seu uso resulta em reduções nas emissões de fuligem, CO, CO₂ e HC, com penalidades muito pequenas nas emissões de NO_x; além disso, em regime permanente, há menor atraso de ignição devido ao seu maior número de cetano e seu valor de aquecimento mais alto, resulta em menor consumo de combustível, baseado em massa, e maior taxa de pico de liberação de calor. Verificou-se ainda que com configurações adequadas de EGR, tanto a fuligem quanto o NO_x podem ser reduzidos, porém deve-se ter cautela pois para taxas de EGR muito altas, os efeitos favoráveis do HVO podem ser eliminados. Além disso, o retardo no tempo de injeção pode levar à redução de NO_x, sem penalidades significativas nas emissões de fuligem. Por fim, o autor destaca que os resultados de sua pesquisa indicam que, do ponto de vista ambiental, o HVO leva a menores emissões em relação ao diesel e que através de reajustes cuidadosos dos parâmetros do motor, essas reduções tornam-se mais próximas das emissões regulamentadas.

2.3 Combustão *Dual-fuel* com Biogás

Devido à sua produção ser a partir de resíduos orgânicos que não possuem valor comercial, e que causam prejuízos ao meio ambiente, o aproveitamento do biogás como combustível nos mais diversos ramos, como por exemplo, em motores de combustão interna (seja como único combustível, ou em modo *dual-fuel*), tem-se mostrado cada vez mais relevante ao longo das últimas décadas. Nesse intuito, diversos autores têm estudado suas aplicações. A seguir são citados alguns trabalhos

e descritas suas principais contribuições onde o biogás é utilizado como combustível em motores de ignição por compressão. Para mais trabalhos na área e sucintas conclusões, o autor sugere a referência Deheri et al. (2020) que faz uma revisão sobre a combustão dual-fuel do diesel com biogás e, também, com hidrogênio.

Tira *et al.* (2010) realizaram um estudo experimental a fim de analisar o comportamento de um motor diesel operando em modo *single-fuel* (diesel), *dual-fuel* (diesel-biogás) e tri-combustível (diesel-biogás-hidrogênio) sendo os combustíveis gasosos injetados no duto de admissão. Com essa finalidade, utilizou-se um motor monocilindro, com sistema EGR, e acoplado a um dinamômetro elétrico. Manteve-se a rotação e a carga do motor constantes. A composição do biogás utilizado foi 60% CH₄ e 40% CO₂ e o volume de cada combustível gasoso adicionado foi de 2%. Foram obtidas as curvas de pressão no cilindro e taxa de liberação de calor no cilindro em função do ângulo do virabrequim, bem como a eficiência térmica, emissões de material particulado, HC, CO e NO_x para os três combustíveis presentes na combustão. Baseado nos resultados obtidos, pode-se notar que a adição apenas de biogás causou uma redução no pico da pressão, mas a adição de hidrogênio resultou em um aumento. Por sua vez, tanto a adição de biogás e biogás com hidrogênio reduziram a eficiência térmica do motor, que foi mais expressiva na presença de hidrogênio. Para as emissões, observou-se um aumento notável para HC e CO, porém com reduções nos níveis de material particulado e NO_x.

Koten, Yilmaz e Gul (2014) analisaram computacionalmente as condições ótimas para operação de um motor diesel operando em modo *dual-fuel* com biogás comprimido, considerando o desempenho da combustão e as emissões. Com essa finalidade, foi considerado um código 1D (AVL Fire Code) e um 3D (Star-CD) e uma otimização multiobjetivo. O diesel foi modelado como dodecano (C₁₂H₂₆) e o motor considerado foi monocilindro de quatro tempos. Variou-se a vazão mássica de diesel e seu início da injeção para o caso *single-fuel*, bem como as cargas do motor para os casos *single* e *dual-fuel*. Comparou-se as curvas de pressão no cilindro para os casos 1D e 3D, bem como para os diferentes casos nos modos *single* e *dual-fuel* no caso 3D. Além disso, os efeitos na taxa de liberação de calor no cilindro, no atraso de ignição, na temperatura dos gases de escape, no consumo de combustível e das emissões de NO_x, fuligem, CO, CO₂ e HC foram comparadas para modos *single* e *dual-fuel* em função do ângulo do virabrequim ou da carga do motor. Com os resultados obtidos, notou-se que na operação *dual-fuel* o pico de pressão no cilindro

e a taxa de liberação do calor reduzem-se, o mesmo foi observado no atraso de ignição. Houve redução na temperatura dos gases de exaustão e, também nas emissões de NO_x e fuligem, porém apresentando aumento nas emissões de HC, CO e CO₂.

Barik, Satapathy e Murugan (2015) analisaram experimentalmente as características de combustão *dual-fuel* diesel-biogás. Para isso, consideraram um motor diesel monocilíndrico, quatro tempos, com injeção direta e acoplado a um dinamômetro elétrico. O biogás utilizado foi produzido a partir de restos de bagaço de sementes da planta Karanja, utilizados para extrair biodiesel, e esterco bovino. Foram medidas as propriedades para ambos os biogases produzidos; a pressão no cilindro, a taxa de liberação de calor, o atraso de ignição, a taxa de crescimento de pressão, a duração da combustão e a fração de massa de combustível queimada considerando diferentes vazão mássicas de biogás, de 0,3 a 1,2 kg/h. Com as medidas tomadas, os autores verificaram que a adição de biogás resulta em maiores atraso de ignição, picos de pressão, pico de taxa de liberação de calor e duração da combustão. Concluindo que o uso de biogás em um motor diesel no modo *dual-fuel*, para geração de energia, parece ser tecnicamente viável, trazendo melhores características de combustão na vazão de 0,9 kg/h.

Ambarita (2017) avaliou, experimentalmente, os efeitos que o fluxo de biogás e sua concentração de metano pode causar no desempenho e nas emissões de um motor de ignição por compressão em operação *dual-fuel* diesel-biogás. Para tal, foi considerado um pequeno motor monocilindro, quatro tempos operando em duas diferentes rotações e potências, sendo o motor acoplado a um gerador conectado a uma série de lâmpadas e o biogás proveniente de bovinocultura. Foram obtidas as curvas para variação da potência de saída, das lâmpadas, eficiência térmica, consumo específico de combustível, e emissões em função da rotação do motor para diferentes taxas de substituição do diesel pelo biogás em duas concentrações de metano, 60 e 70%. A partir do estudo realizado, concluiu-se que a operação *dual-fuel* resulta em maiores potências de saída e eficiência térmica em baixo fluxo de biogás, mostrando que há uma taxa ideal para a máxima eficiência térmica, o que é afetada pela velocidade e carga do motor e concentração de CH₄ no biogás. Verificou-se também aumento no consumo de combustível e nas emissões de CO e HC na operação *dual-fuel*, possuindo relação direta com a taxa de substituição, dada em vazão do biogás.

Adhavan, Sathishkumar e Ibrahim (2018) realizaram uma investigação numérica a fim de verificar os efeitos da variação da composição do biogás, da razão de equivalência e da temperatura de admissão na combustão em um motor de ignição por compressão de carga homogênea operando apenas com biogás. Para tal, foi considerado um modelo 3D de um motor 4 tempos, simétrico em um setor de 60°, em CFD com modelo de turbulência RNG- $k-\epsilon$ utilizando o software CONVERGE 2.3 e empregada uma cinética química detalhada, sendo o GRI-Mech 3.0 o mecanismo de reação utilizado para a simulação de combustão. Considerou-se duas razões de equivalências e seis composições de biogás, variando as concentrações de CH_4 e CO_2 . Foram apresentados estudos de convergência de malha computacional e validação experimental, além da variação da pressão no cilindro e das concentrações de NO_x e HC em função da concentração de metano, da razão de equivalência e da temperatura de entrada do combustível. Os autores concluíram que maior concentração de CH_4 aumenta a taxa de queima de combustível, resultando em uma combustão mais avançada, enquanto que uma maior concentração de CO_2 provoca um efeito inverso. Além disso, em baixas concentrações de metano, deve-se ter uma alta temperatura na admissão para ter-se a combustão. Maiores concentrações de CH_4 no biogás resulta em reduções nas emissões de HC, porém ocasionando aumento nas emissões de NO_x , sendo estas muito baixas para todos os casos analisados.

Undale e Shaikh (2019) analisaram computacionalmente a aplicação do biogás em uma combustão *dual-fuel* com diesel, considerando o desempenho de um motor de ignição por compressão e suas emissões. Para tal, utilizou-se o software AVL-BOOST, um motor monocilindro de quatro tempos, modelo Ricardo E-6. Foram feitos testes com carga constante e variação na rotação e outros com variação na carga e rotação constante. A taxa de substituição de biogás foi de 0, 10, 20 e 40% injetado de forma semidireta, no tubo de admissão. As variações do consumo específico de combustível, da eficiência térmica, da eficiência volumétrica, da temperatura dos gases de exaustão, bem como da concentração de NO_x e fuligem foram obtidas computacionalmente. Com os resultados obtidos, pôde-se notar que o biogás aumenta o consumo de combustível, em cargas parciais, devido à sua menor densidade de energia, temperatura mais baixa no cilindro e presença de CO_2 no biogás, que evita uma queima mais rápida. Houve redução na eficiência volumétrica, devido à substituição do ar pelo biogás, em todos os casos e, para a eficiência térmica,

há redução em operações de carga parcial. Verificou-se também redução na temperatura dos gases de exaustão e nas emissões de NO_x, chegando em torno de 40% para a mistura com 40% de biogás. Além disso, as emissões de fuligem reduziram-se significativamente com o aumento da porcentagem de biogás. De forma geral, os autores do trabalho concluíram que uma mistura diesel-biogás 60-40% é eficaz tanto para melhor desempenho quanto para redução de emissões no motor analisado.

Owczuk *et al.* (2019) realizaram testes experimentais em um motor de um trator a fim de avaliar a aplicabilidade do biogás como combustível. Para tal, foram realizados testes em três estágios: 1) teste de potencial bioquímico de metano, 2) testes de motor em dinamômetro e 3) testes de campo com uso de trator. O biogás utilizado possui teor de metano maior que 60%. Caracterizou-se o biogás para diferentes tipos de matérias-primas no primeiro estágio. No segundo estágio, considerando uma mistura de 60% CH₄ e 40% CO₂ obteve-se as curvas de pressão no cilindro para duas diferentes rotações do motor, e as emissões de CO, HC, NO_x e MP para diferentes cargas do motor. Já no terceiro estágio, analisou-se as características do óleo do motor após operação *dual-fuel* em diferentes condições dinâmicas. A partir dos testes realizados, observou-se que resíduos vegetais biodegradáveis e uma mistura de resíduos municipais biodegradáveis com dreno de usina de compostagem produzem um melhor biogás, com maior teor de metano e volume de produção e com menor sulfeto de hidrogênio. Os testes realizados no dinamômetro mostraram que a operação *dual-fuel* é estável para até cerca de 40% de biogás, além de contribuir na redução de material particulado. Entretanto, notou-se um aumento nas emissões de HC e CO e sem mudanças significativas para NO_x. Os testes de campo mostraram que não houve alterações significativas no funcionamento do trator na operação *dual-fuel*, nem consumo excessivo de combustível ou emissões extra de fumaça e aumento de ruídos na partida do motor, alterações negativas no sistema de lubrificação do motor também não foram constatadas.

Ga e Thai (2020) analisaram através de simulações computacionais as características de combustão e de emissões de um motor *dual-fuel* operando com biogás-éter dimetílico (DME) variando-se o teor de DME (no intuito de potencializar a combustão), composição de biogás e injeção de diesel. Nesse intuito, considerou-se um motor diesel *retrofit*, convertido de um monocilindro 4 tempos com razão de compressão reduzida de 20 para 18. As simulações foram realizadas pelo ANSYS

Fluent, com modelo de turbulência RNG $k-\varepsilon$ a utilizando uma malha dinâmica para modelar o cilindro e a câmara de combustão. Formação de NOx e Soot foram modeladas pelo mecanismo de Zeldovich e Magnussen, respectivamente. Foi considerando o modelo *Taylor Analogy Breakup* para descrever o *spray* e a evaporação do diesel. Uma gama de resultados foi apresentada pelos autores, incluindo as variações percentuais de HC e O₂ e campo de velocidade do ar em posições do virabrequim, sem combustão; campos de temperatura, concentração de combustível, fração volumétrica de fuligem, CO e NOx no ponto morto superior, com combustão; além de outras curvas, como pressão no cilindro, taxa de liberação de calor e trabalho indicado também foram apresentadas, em função da concentração de DME, composição de Biogás e da injeção piloto de diesel. A partir do estudo realizado, verificou-se que a distribuição de combustível não foi homogênea no coletor de admissão; para qualquer composição de biogás, o teor de DME na mistura *dual-fuel* ocasiona aumento no trabalho indicativo e formação de NOx, mas, em contra partida, uma redução nas emissões de CO e fuligem; por sua vez, a composição do biogás afeta ligeiramente o desempenho e a emissão. Concluindo, a substituição da ignição piloto a diesel pela DME é uma solução ideal para melhoria do desempenho e redução das emissões.

Ahmed *et al.* (2020) analisaram numericamente os efeitos da proporção de CO₂ no biogás, produzido através de dejetos da suinocultura e de palha de milho, no desempenho e nas emissões de um motor ciclo diesel. Utilizou-se o software GT-Power, de análise de motor 1-D, para modelar um motor turbo de injeção direta e seis cilindros. Foram consideradas quatro cargas diferentes do motor em uma rotação constante e cinco diferentes composições de CO₂ no biogás, produzidos pelos autores num biodigestor CSTR. Validou-se o modelo numérico desenvolvido para a eficiência térmica ao freio e pressão no cilindro com dados experimentais. Foram obtidas as curvas de eficiência térmica, consumo específico de combustível, temperatura dos gases de exaustão, emissões de CO₂, HC e NOx em função da carga do motor e das concentrações de CO₂ no biogás. Além disso, as curvas de pressão no cilindro, taxa de liberação de calor e seu acúmulo e o campo de temperaturas em função do ângulo do virabrequim também foram obtidas. Os autores observaram que a eficiência térmica aumenta quanto mais biogás é adicionado, porém a concentração de CO₂ não impacta na mesma, maiores concentrações de biogás na operação *dual-fuel* reduziram as temperaturas dos gases de exaustão. Em relação às emissões, houve

redução nas emissões de NO_x e CO, mas para HC e CO₂ teve um aumento, sendo mais considerável para os hidrocarbonetos não queimados. Por sua vez, as características de combustão no modo *dual-fuel* apresentaram padrões similares independente da carga do motor, porém a pressão máxima no cilindro e a taxa de liberação de calor foram menores.

Ma *et al* (2022) analisaram numericamente a influência do dióxido de carbono nas características de combustão e emissões de NO_x, em operação *dual-fuel* diesel-biogás. Nesse intuito, utilizou-se o software ANSYS Chemkin-Pro combinado com o mecanismo GRIMECH 3.0 e concentrações de CO₂ com metano, para formar o biogás, nas concentrações de 0-41,6%. Foram obtidas as curvas que mostram a variação da temperatura de chama e sua velocidade de propagação e concentrações de NO e NO₂ para diferentes concentrações de CO₂. Com base nos resultados obtidos, verificou-se que o aumento de CO₂ resulta na redução da temperatura e da velocidade de propagação da chama. Além disso, observou-se também que a concentração de NO reduz com o aumento de CO₂, enquanto que para NO₂ não há um efeito regular, há redução e aumento, tendo seu maior valor em torno de 34%.

Considerando a revisão bibliográfica realizada, observou-se que a utilização dos combustíveis provenientes de fontes renováveis, HVO e biogás, em motores de combustão interna contribui positivamente para a redução nas emissões de poluentes, seja no modo *single-fuel*, seja no *dual-fuel*. Além disso, notou-se ainda que os estudos que simulam computacionalmente o processo de combustão em motores apresentaram resultados com tendências similares às observadas através de experimentos, indicando ser esta uma ferramenta de grande relevância na condução de pesquisas na área. Ademais, verificou-se grande escassez em trabalhos de simulações 3D para analisar a combustão do HVO em modo *single-fuel* e, mais ainda a combustão *dual-fuel* de HVO com biogás, motivando assim a realização e contribuições científicas através das análises numérico/computacionais realizadas ao longo desse trabalho de mestrado.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

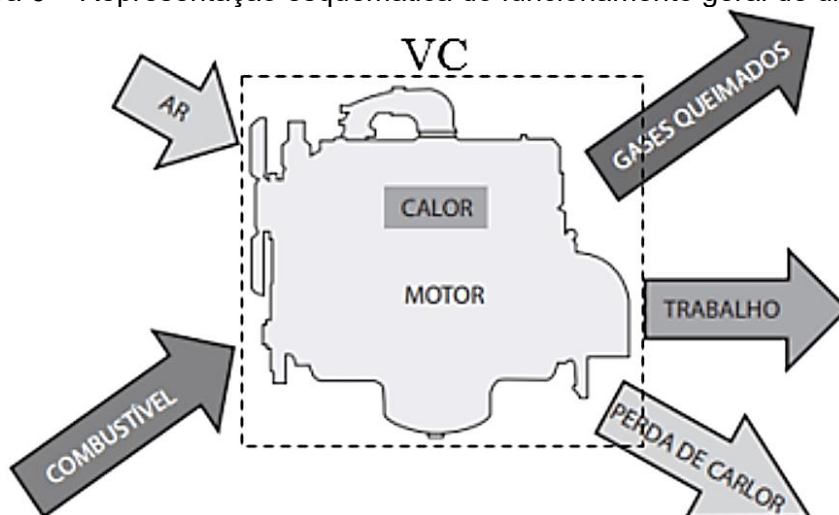
Essa seção apresenta um breve resumo sobre a fundamentação teórica dos motores de combustão interna, trazendo principais definições, classificações e ciclos termodinâmicos, focando no motor de ciclo Diesel que é o objetivo desse trabalho. Além disso, nessa seção também são apresentados sucintamente os combustíveis empregados nos testes do motor considerado, e suas principais características.

3.1 Motores de Combustão Interna

Motores de combustão interna (MCI), são máquinas térmicas amplamente utilizadas nos dias atuais. Esse tipo de motor, que utiliza a queima de um combustível para gerar trabalho (transformação da energia química em energia mecânica), está presente na grande maioria dos veículos automotores em circulação, bem como em aplicações estacionárias para geração de energia.

Segundo Brunetti (2012), o trabalho obtido pelos motores de combustão interna é devido a uma sequência de processos realizados pelo fluido ativo, que é formado pela mistura ar e combustível e pelos produtos da combustão na entrada e na saída do volume de controle, VC, respectivamente, o que está representado esquematicamente na Figura 6.

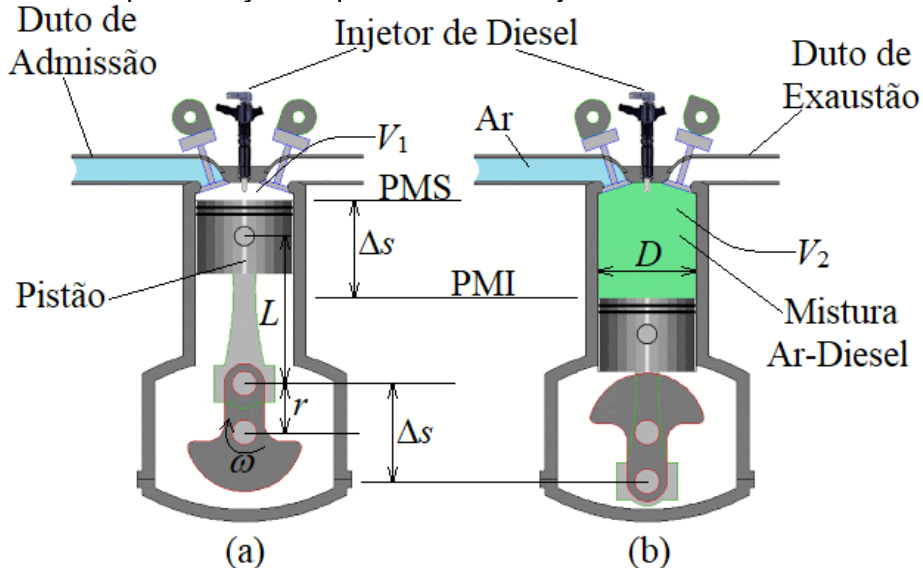
Figura 6 – Representação esquemática do funcionamento geral de um MCI



Fonte: Adaptado de Brunetti (2012).

Nos motores de combustão interna, o fluido ativo participa diretamente do processo de combustão. Além disso, esses motores normalmente são do tipo alternativos, ou seja, há um movimento rotativo de um conjunto biela-manivela de um pistão, como representado na Figura 7 em duas posições distintas: no ponto morto superior, Figura 7(a), e no ponto morto inferior, Figura 7(b). A figura também esboça os dutos de admissão e de exaustão e o bico injetor de diesel.

Figura 7 – Representação esquemática do conjunto biela-manivela, de um MCI



Legenda: Pistão no (a) ponto morto superior (PMS) e (b) ponto morto inferior (PMI).

Fonte: Adaptado de GIFIMAGE (2021).

Na Figura 7, Δs e D referem-se, respectivamente, ao curso e ao diâmetro do pistão; L é o comprimento da biela; r é o raio da manivela; ω é a velocidade angular de rotação da árvore de manivelas; V_1 e V_2 são, respectivamente, os volumes morto e total da câmara de combustão, compreendidos entre a cabeça do pistão e o cabeçote quando o mesmo se encontra no PMS e no PMI, nessa ordem.

A partir dessas duas posições definidas, são definidos a cilindrada unitária, o volume deslocado e a taxa de compressão, ou razão volumétrica, do motor. Sendo estes obtidos pelas equações seguintes.

$$V_{du} = V_2 - V_1 = \frac{\pi D^2}{4} \cdot \Delta s \quad (1)$$

onde V_{du} refere-se ao volume deslocado útil, ou cilindrada unitária.

Para um motor multicilindro, a cilindrada será o produto da cilindrada unitária pelo número z de cilindros, ou seja,

$$V_d = V_{du} \cdot z = \frac{\pi D^2}{4} \cdot \Delta s \cdot z \quad (2)$$

A razão de compressão, ou relação volumétrica é a razão entre o volume total e o volume morto, e esse número representa em quantas vezes o volume total é reduzido. Matematicamente,

$$RC = \frac{V_2}{V_1} = \frac{V_{du} + V_1}{V_1} = \frac{V_{du}}{V_1} + 1 \quad (3)$$

onde V_{du} refere-se ao volume deslocado útil, ou cilindrada unitária.

Segundo Brunetti (2012), para um motor diesel, a taxa de compressão varia de 15,0:1 até 24,0:1.

Pode-se também obter relações cinemáticas para o movimento do pistão utilizando-se as medidas da biela-manivela representadas na Figura 7(a). Tem-se as seguintes relações básicas:

$$\Delta s = 2r \quad (4)$$

$$\omega = 2\pi f \quad (5)$$

$$v_p = 2\Delta s f = \frac{2\omega r}{\pi} \quad (6)$$

Sendo θ o ângulo formado entre a manivela e um eixo vertical de referência, ou ângulo do virabrequim, onde $\theta = 0^\circ$ quando o pistão está no PMS e $\theta = 180^\circ$ quando está no PMI, calcula-se a distância para o pistão atingir o PMS pela Eq. (7) (HEYWOOD, 2018).

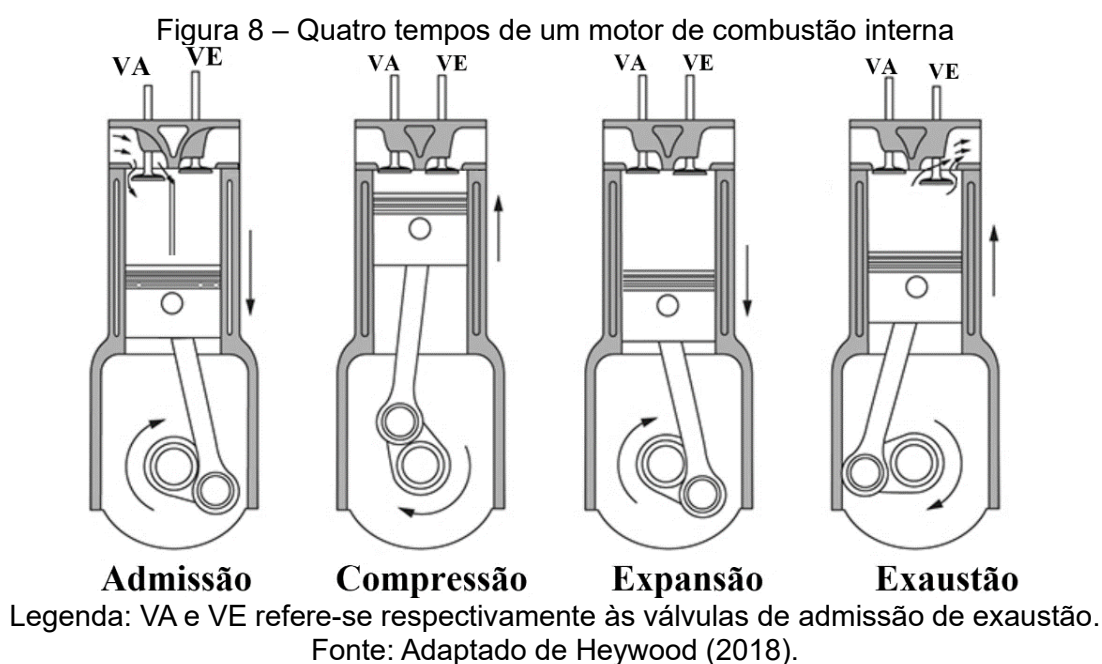
$$x(\theta) = \frac{\Delta s}{2} \left[\left(\frac{r}{L} \right) + 1 - \cos(\theta) - \sqrt{\left(\frac{r}{L} \right)^2 - \sin^2(\theta)} \right] \quad (7)$$

logo, o deslocamento volumétrico do motor, ou cilindrada pode ser expresso como

$$V_d = V_1 + x \cdot \frac{\pi D^2}{4} = V_1 + \frac{V_{du}}{2} \left[\left(\frac{r}{L} \right) + 1 - \cos(\theta) - \sqrt{\left(\frac{r}{L} \right)^2 - \sin^2(\theta)} \right] \quad (8)$$

Os motores de ciclo Diesel, também denominados motores de ignição espontânea, realizam a compressão do ar até que seja atingida uma temperatura suficientemente elevada (temperatura de autoignição, TAI), em seguida é feita a injeção do combustível e ocorre-se espontaneamente o processo de combustão. Para o diesel, tem-se que $TAI = 250^{\circ}\text{C}$, enquanto que para a gasolina misturada com 22% de etanol anidro (gasolina E22), $TAI = 400^{\circ}\text{C}$, e para o etanol hidratado $TAI = 420^{\circ}\text{C}$ (BRUNETTI, 2012).

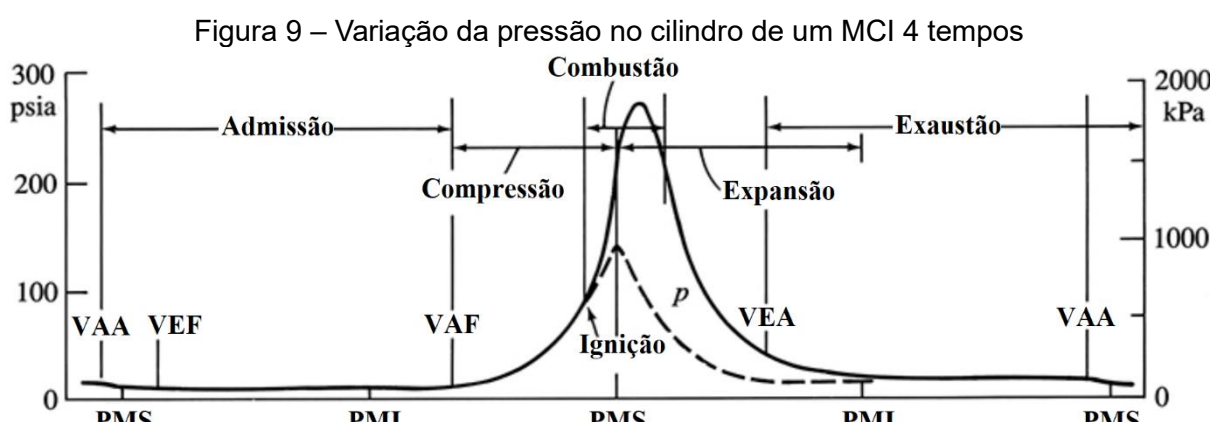
O ciclo de operação dos motores veiculares é o de quatro tempos (relacionado com o movimento de um ciclo de um pistão). Esse ciclo está relacionado com a sequência das operações que são realizadas pelo fluido ativo e que se repetem de forma cíclica. Na Figura 8 podem ser observados essas quatro operações realizadas pelo fluido ativo em um motor diesel.



- **Primeiro Tempo (Admissão):** há a abertura da válvula de admissão, permitindo a sucção do ar, devido ao deslocamento do pistão dos pontos mortos superior ao inferior, para dentro do cilindro.
- **Segundo Tempo (Compressão):** inicia-se a compressão, onde ambas as válvulas (de admissão e de exaustão) devem estar fechadas. O pistão parte do PMI, comprimindo o ar para uma pequena fração do volume inicial, quando o pistão está próximo ao PMS, comprimindo de forma que a temperatura seja suficientemente elevada e acima da TAI do combustível.

- **Terceiro Tempo (Exaustão):** injeta-se o combustível no ar quente e a combustão espontânea é realizada. É nessa etapa em que o trabalho útil do motor é efetuado, através do brusco aumento de pressão, decorrente da ignição ao final da compressão. Este aumento de pressão faz com que o pistão seja forçado do PMS ao PMI e o deslocamento axial do pistão realize a rotação da árvore de manivelas.
- **Quarto Tempo (Exaustão):** iniciado através da abertura da válvula de escape, com o pistão no PMI. Desta forma, ao haver o deslocamento do êmbolo em direção ao PMS, ocorre a expulsão dos gases provenientes do processo de combustão, para o sistema de escapamento do veículo.
Finalizado o quarto tempo, a válvula de admissão se abre e o ciclo reinicia-se.

Na Figura 9 é apresentada as curvas da variação da pressão no cilindro, p , em função da posição da cabeça do pistão, PMS e PMI (em geral definidos pelo ângulo do virabrequim), para os quatro tempos do motor de compressão interna.



Legenda: As abreviaturas na figura referem-se ao fechamento e abertura das válvulas, sendo VAA = válvula de admissão aberta, VEF = válvula de exaustão fechada, VAF = válvula de admissão fechada, VEA = válvula de exaustão aberta.

Fonte: Adaptado de Heywood (2018).

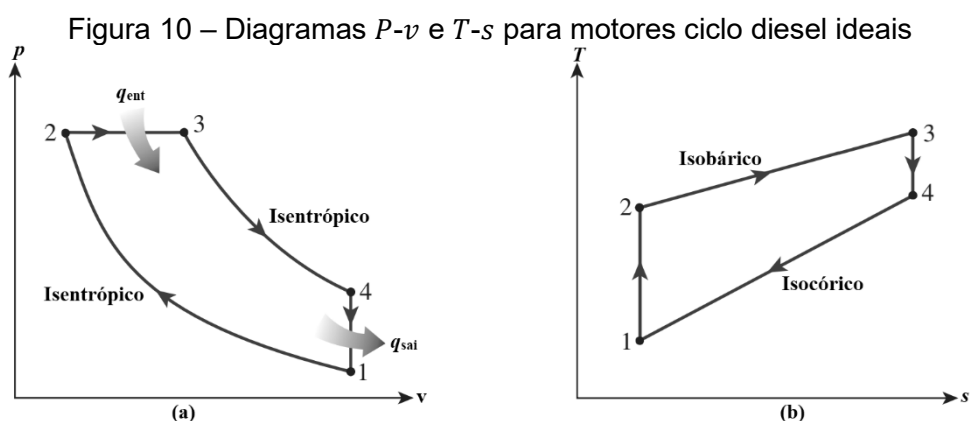
Observe que durante o ciclo de operação, o pistão percorreu o curso quatro vezes e o eixo do motor realizou duas voltas, indo de PMS à PMI, PMI à PMS, completando uma volta de 360°, de PMS à PMI e PMI à PMS, completando outra volta de 360°.

3.1.1 Ciclos termodinâmicos de MCI's Diesel

Dispositivos como motores de combustão interna produzem potência operando em ciclos, o que ocorre através da queima do combustível, ou combustíveis no caso *dual-fuel*, dentro das fronteiras do sistema (ÇENGEL, 2013).

Como apresentado na Seção 3.1 e, segundo Çengel (2013), nos MCI por compressão, a injeção do combustível ocorre quando o pistão se aproxima do PMS (vide Figura 7(a)), continuando durante a primeira parte do processo expansão, de forma que seu processo de combustão é mais longo que o de motores ciclo Otto. Logo, a combustão nesse tipo de motores é idealizada como sendo um processo de fornecimento de calor à pressão constante.

Considerando a idealização do ciclo, ou seja, considerando adição de calor a pressão constante e rejeição dos gases forma instantânea, ou seja, a volume constante e desconsiderando perdas por atrito, dissipação de calor e outros efeitos que reduzam a eficiência, a Figura 10 apresenta os diagramas pressão-volume ($p-v$) e temperatura-entropia ($T-s$) para motores de ignição por compressão.



Legenda: (a) Diagrama pressão-volume. (b) Diagrama temperatura-entropia.

Fonte: Adaptado de Çengel (2013).

A partir dos diagramas da Figura 10, tem-se que os seguintes processos:

- 1-2: compressão isentrópica (entropia constante), onde há aumento da pressão e da temperatura e redução do volume específico;
- 2-3: adição de calor isobárica (pressão constante), onde há aumento do volume específico, da temperatura e da entropia;
- 3-4: expansão isentrópica, com aumento do volume específico e redução da pressão e da temperatura;
- 4-1: liberação de calor isocórica (volume constante), com redução da pressão, da temperatura e da entropia.

Considerando os diagramas apresentados na Figura 10, as áreas internas formadas pelas curvas 1-2-3-4 para cada diagrama, Figura 10(a) e Figura 10(b), representam, respectivamente, o trabalho e o calor útil do ciclo.

O trabalho do ciclo é dado pela diferença entre o trabalho na expansão e na compressão, ou seja,

$$w_c = w_{exp} - w_{comp} \quad (9)$$

onde w_c , w_{exp} e w_{comp} são os trabalhos do ciclo, de expansão e de compressão, respectivamente.

Por sua vez, o calor útil do ciclo é dado pela diferença entre o calor que entra e o calor que sai, ou seja,

$$q_c = q_{ent} - q_{sai} \quad (10)$$

onde q_c , q_{ent} e q_{sai} são os calores do ciclo, de entrada e de saída, respectivamente.

Haja visto que o sistema é fechado, a partir da primeira lei da Termodinâmica, desprezando-se as energias cinética e potencial, pode-se relacionar o calor e o trabalho com a energia interna através da relação

$$q - w = \Delta u \rightarrow q - w = u_f - u_i \quad (11)$$

onde u_f e u_i referem-se às energias internas final e inicial do ciclo.

Para um ciclo, as energias internas final e inicial são iguais, ou sua variação é nula. Dessa forma, para o ciclo tem-se que

$$q_c - w_c = 0 \rightarrow w_c = q_c \rightarrow w_c = q_{ent} - q_{sai} \quad (12)$$

O calor que entra no ciclo, processo 2-3, é transferido à pressão constante e, por sua vez, o calor que é rejeitado do ciclo, processo 4-1, é transferido à volume constante. Assim, a partir da primeira lei da termodinâmica e das definições de trabalho e entalpia, considerando calor específico constante, tem-se:

$$q_{ent} = c_p(T_3 - T_2) \quad (13)$$

e

$$q_{sai} = c_v(T_4 - T_1) \quad (14)$$

onde c_p e c_v representam os calores específicos à pressão e a volume constantes, respectivamente.

A eficiência térmica para esse ciclo é dada pela razão entre o trabalho do ciclo e o calor fornecido pela fonte, ou seja,

$$\eta_c = \frac{w_c}{q_{ent}} = 1 - \frac{q_{sai}}{q_{ent}} \quad (15)$$

onde η_c corresponde à eficiência do ciclo.

Em termos de temperatura, a partir das Eqs. (13) e (14), a eficiência do ciclo é reescrita como

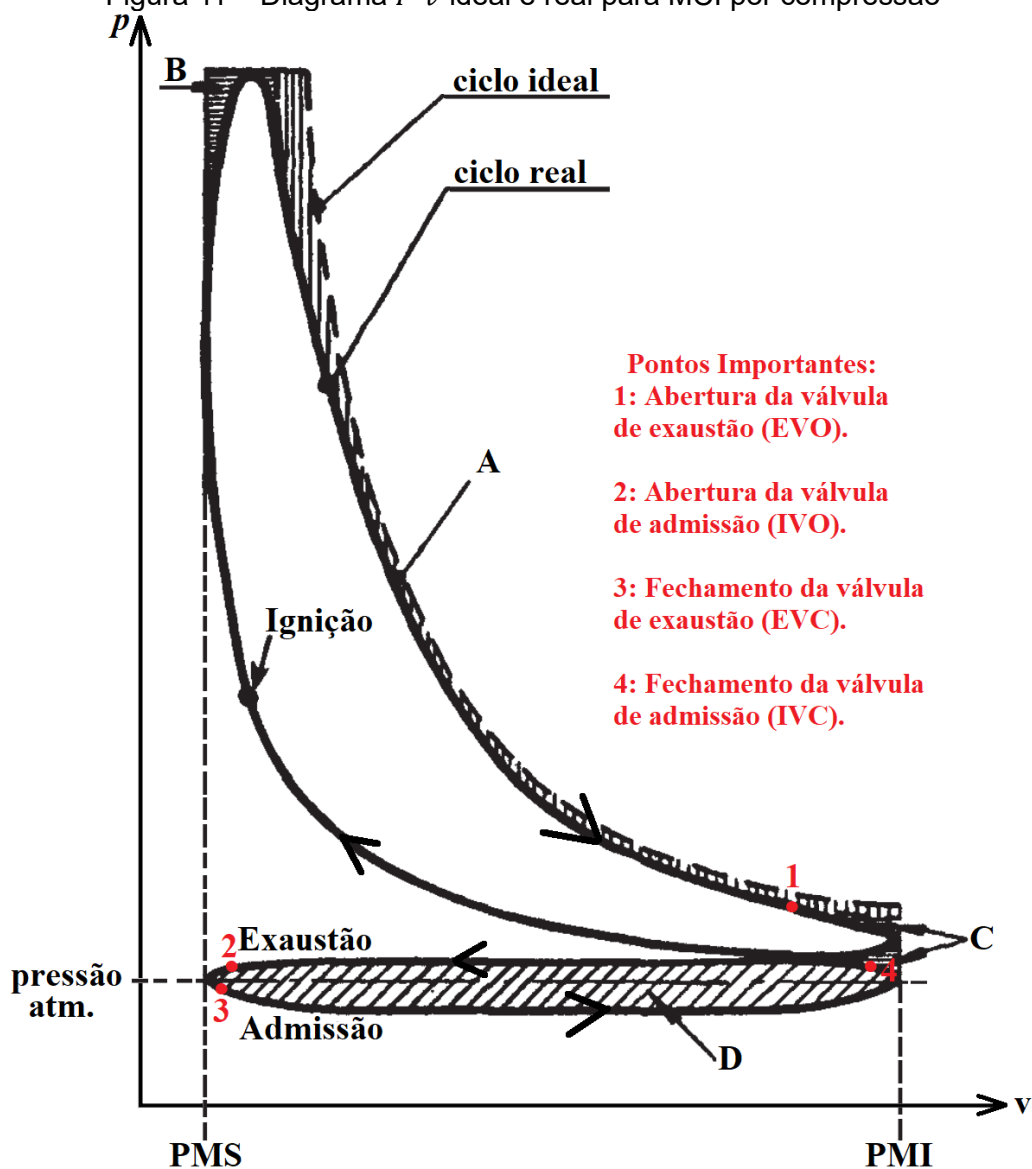
$$\eta_c = 1 - \frac{1}{k} \left(\frac{T_4 - T_1}{T_3 - T_2} \right) \quad (16)$$

onde k é a razão entre os calores específicos.

Os ciclos reais são obtidos através de experimentos utilizando aparelhos capazes de capturar o comportamento da combustão para os MCI, informando as condições reais de trabalho, como perdas de calor, tempo de combustão, perdas por atrito, tempos de injeção, abertura e fechamento das válvulas de admissão e exaustão e condições de ignição (GIACOSA, 1989; OLIVEIRA, 2018). A Figura 11 compara as curvas pressão $\times$ volume específico dos ciclos ideal e real de um motor ciclo diesel.

As áreas A, B, C e D representam as diferenças entre os ciclos ideal (teórico) e real estão relacionadas com a perda de trabalho útil, devido à: perdas de calor entre o fluido e a parede do cilindro do motor (destacado pela área A na Figura 11); combustão não instantânea, devido à antecipação da ignição (área B na Figura 11); antecipação do tempo de abertura das válvulas de exaustão, em relação ao suposto no ciclo teórico (área C da Figura 11) e diferença de pressão entre a exaustão e a admissão, respectivamente maior e menor que a pressão atmosférica, na maioria dos casos (destacado pela área D na Figura 11) (OLIVEIRA, 2018).

Figura 11 – Diagrama $P-v$ ideal e real para MCI por compressão



3.1.2 Parâmetros de Desempenho e Consumo de Combustível

O trabalho indicado líquido, a cada ciclo e para cada cilindro, parte de sua definição física, ou seja, da relação integral entre pressão e volume no ciclo. Assim, tem-se que (HEYWOOD, 2018):

$$W_i = \oint p_i dV \quad (17)$$

Essa relação é a mesma utilizada para obtenção das Eqs. (13) e (14), que corresponde ao trabalho realizado pelos gases da combustão no ciclo ar-combustível.

A potência indicada, $\dot{W}_i$, por ciclo para cada cilindro refere-se à potência desenvolvida pelo ciclo termodinâmico do fluido ativo (BRUNETTI, 2012; HEYWOOD, 2018). Matematicamente, tem-se que

$$\dot{W}_i = \frac{W_i \cdot N}{n_c} \quad (18)$$

onde N é a velocidade de rotação do motor e n_c refere-se ao número de ciclos do motor, dividido por 2 (assim, para um motor dois tempos, $n_c = 1$ e para um motor quatro tempos, $n_c = 2$).

A potência calculada na Eq. (18) refere-se à soma da potência propriamente útil, $\dot{W}_u$, e da potência de atrito, $\dot{W}_f$, (relacionada com as perdas). Logo,

$$\dot{W}_i = \dot{W}_u + \dot{W}_f \quad (19)$$

A pressão média efetiva indicada, conhecida como *IMEP* (*Indicated Mean Effective Pressure*, do inglês), é dada pela relação entre o trabalho indicado e o volume deslocado, calculado pela Eq. (2). Assim, tem-se que

$$IMEP = \frac{W_i}{V_d} = \frac{\dot{W}_i n_c}{N V_d} \quad (20)$$

A pressão média efetiva ao freio, conhecida como *BMEP* (*Break Mean Effective Pressure*, do inglês), é calculada, considerando o torque de freio do motor através da relação

$$BMEP = \frac{2\pi T n_c}{V_d} \quad (21)$$

onde T é o torque desenvolvido pelo motor.

A pressão média efetiva de bombeamento, conhecida como *PMEP* (*Pump Mean Effective Pressure*, do inglês) é determinada a partir da pressão no cilindro em relação às porções de admissão e de escape do ciclo de um motor. A *PMEP* é obtida através calculando-se as pressões na admissão e na exaustão, pela Eq. (17), e somando-as, ou seja, (DA COSTA, 2021):

$$PMEP = \frac{1}{V_d} \left[\left(\int_{PMS}^{PMI} p_i dV \right)_{\text{admissão}} + \left(\int_{PMI}^{PMS} p_i dV \right)_{\text{exaustão}} \right] \quad (22)$$

Similar ao descrito para as potências, vide Eq. (19), pode-se obter a pressão média efetiva de freio, *FMEP* (*Friction Mean Effective Pressure*, do inglês). Tem-se que

$$FMEP = IMEP - BMEP \quad (23)$$

Na literatura são encontrados alguns modelos para estimar o valor de *FMEP*, como o modelo de Chen e Flynn (1965) que considera uma variação linear da perda, no motor de ignição por compressão, com a pressão máxima (ou pico de pressão) no cilindro e a velocidade do pistão.

O rendimento mecânico do motor é calculado pela relação entre as potências útil e indicada, ou seja,

$$\eta_{mec} = \frac{\dot{W}_e}{\dot{W}_i} \quad (24)$$

O consumo específico de combustível, *SFC* (*Specific Fuel Consumption*, do inglês), é obtido pela razão entre a vazão mássica de combustível injetada e a potência indicada, ou seja,

$$SFC = \frac{\dot{m}_f}{\dot{W}_i} \quad (25)$$

Como MCI's produzem potência através da queima do combustível, a taxa de produção de calor, que se relaciona com a potência através da primeira lei da termodinâmica, pode ser escrita em função do calor fornecido ao motor pelo PCI (poder calorífico inferior) do combustível através da relação

$$\dot{q} = \dot{m}_f \cdot PCI \quad (26)$$

onde $\dot{m}_f$ é a vazão mássica do combustível e *PCI* seu poder calorífico inferior.

Assim, da primeira lei da termodinâmica e das eficiências térmica, indicada e mecânica, obtém-se a relação para cálculo da eficiência de conversão de combustível indicada (BRUNETTI, 2012; HEYWOOD, 2018):

$$\eta_{fi} = \frac{\dot{W}_i}{\dot{q}} = \frac{\dot{W}_i}{\dot{m}_f \cdot PCI} \quad (27)$$

Segundo Heywood (2018), para combustíveis com base em hidrocarbonetos, utilizados em motores de combustão interna, o PCI varia entre 42 a 44 MJ/kg.

3.1.3 Processos de Combustão em MCI

Nessa seção são apresentados conceitos fundamentais em relação aos processos de combustão em motores, especificamente voltados aos de ciclo diesel.

Segundo Carvalho Jr. *et al.* (2018), processos de combustão são caracterizados por reações exotérmicas muito rápidas entre um combustível (ou dois, no caso *dual-fuel*) e oxidante, acompanhada pela liberação de calor, em geral ocasionada pelos elementos químicos presentes nos combustíveis (carbono, hidrogênio e enxofre, por exemplo). Assim, de forma geral, uma reação química de combustão pode ser descrita de resumidamente na forma como



O ar é o oxidante responsável pelo processo de combustão nos motores de combustão interna. Assim, a quantificação da quantidade de ar em relação ao combustível é de suma importância na análise da combustão desses sistemas, o que é feito através da razão ar/combustível (AC), ou AFR (*air-fuel ratio*, do inglês), que representa a relação entre a massa de ar e de combustível presente no processo. Matematicamente, tem-se que

$$AC = AFR = \frac{m_{ar}}{m_{combustível}} \quad (29)$$

As massas de ar e de combustível podem ser expressas em relação às respectivas massas molares do combustível e do ar com seus respectivos coeficientes

obtidos através do balanceamento da equação química que representa a reação de combustão. A razão combustível ar, CA , é o inverso de AC .

Uma reação de combustão pode ser classificada como estequiométrica, rica ou pobre, dependendo da quantidade de ar em relação à quantidade de combustível. A quantidade mínima de ar necessária para queimar completamente o combustível é denominada ar estequiométrico, ou teórico, o que acarretará na não presença de oxigênio nos produtos da combustão (ÇENGEL, 2013). Para quantidades de ar acima da estequiométrica, há um excesso de ar e, de modo contrário, para quantidades inferiores à estequiométrica, há deficiência de ar.

A razão de equivalência, ϕ , relaciona essas quantidades de ar em um processo de combustão. Assim, tem-se que (TURNS, 2012)

$$\phi = \frac{AC_{est}}{AC_{real}} = \frac{CA_{real}}{CA_{est}} \quad (30)$$

onde AC_{est} e AC_{real} representam, respectivamente, as razões ar-combustível para uma reação estequiométrica e para uma reação de combustão real.

O inverso da razão de equivalência, é denominado fator lambda

$$\lambda = \frac{1}{\phi} = \frac{AC_{real}}{AC_{est}} \quad (31)$$

Das Eqs. (30) e (31), classifica-se uma reação de combustão como:

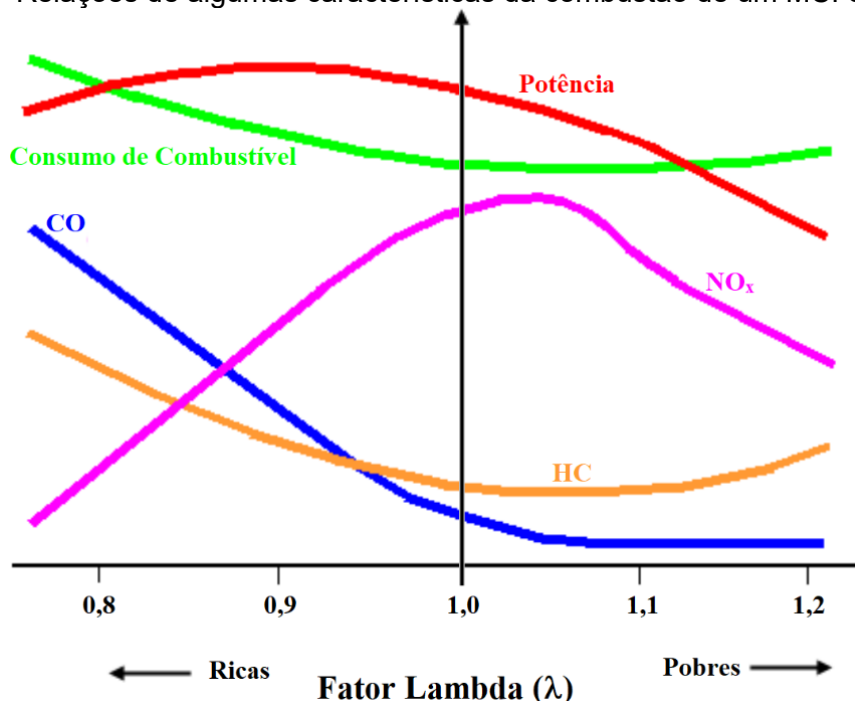
- $\phi = 1$ ou $\lambda = 1$: combustão estequiométrica;
- $\phi < 1$ ou $\lambda > 1$: combustão pobre, há maior quantidade de ar (ou menor de combustível) que a presente na reação estequiométrica, ou seja, há excesso de ar;
- $\phi > 1$ ou $\lambda < 1$: combustão rica, há menor quantidade de ar (ou maior de combustível) que para a reação estequiométrica, logo, deficiência de ar.

Os valores de ϕ , ou do seu inverso (λ), estão intimamente relacionados com o desempenho do motor, seu consumo de combustível e nas emissões de gases poluentes provenientes dos produtos da combustão (DA COSTA, 2017). Essa relação pode ser observada na Figura 12.

Analisando a Figura 12, nota-se que as emissões de CO são reduzidas (quase linearmente) com o aumento do fator lambda. Já as emissões de HC, sofrem uma

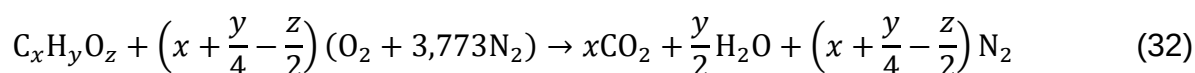
redução conforme a combustão torna-se próxima à estequiométrica ($\lambda = 1$), até um limite mínimo, que ocorre em torno de $\lambda = 1,05$ e, posteriormente, apresenta um crescimento. Por sua vez, as emissões de NO_x crescem, de forma quase linear na região de mistura rica com um valor máximo em torno de $\lambda = 1,05$ e, em seguida apresenta um decréscimo em valor. A potência do motor aumenta com λ até aproximadamente $\lambda = 0,9$, onde passa a reduzir-se quanto maior é a quantidade de combustível na reação. Por sua vez, o consumo de combustível reduz-se com a redução da quantidade de ar, até um limiar em torno de $\lambda = 1,08$, tendo seu valor aumentado quanto mais pobre a combustão se torna.

Figura 12 – Relações de algumas características da combustão de um MCI com o fator λ



Fonte: Adaptado de Tongchit (2011).

Considerando uma reação estequiométrica de combustão de um hidrocarboneto generalizado, cuja fórmula é $C_xH_yO_z$ sua forma geral, já balanceada, é descrita como (HEYWOOD, 2018)



Note que, para uma mistura *dual-fuel*, qualquer combustível secundário injetado pode ser calculado de forma a modificar apenas os valores de x , y e z na fórmula geral do hidrocarboneto.

Assim, seguindo da definição da razão de ar combustível, Eq. (29), tem-se que a razão ar combustível estequiométrica é dada por

$$AC_{est} = \frac{\left(x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2}\right) (MM_{O_2} + 3,773 \cdot MM_{N_2})}{x \cdot MM_C + y \cdot MM_H + z \cdot MM_O} \quad (33)$$

onde MM refere-se às massas molares dos componentes.

Considerando-se os dados obtidos experimentalmente, vazão de ar na admissão e vazão de combustível (seja ele primário e/ou secundário), o fator lambda descrito na Eq. (31) pode ser reescrito na seguinte forma

$$\lambda = \frac{1}{\phi} = \frac{\dot{m}_{ar}/\dot{m}_{comb}}{AC_{est}} \quad (34)$$

onde $\dot{m}_{ar}$ e $\dot{m}_{comb}$ são as vazões mássicas de ar e de combustível, respectivamente.

3.1.4 Estimação da Temperatura Média dos Gases no Cilindro

A obtenção da temperatura média no cilindro é extremamente complexa, não sendo possível de se obter diretamente a partir de medições, com um termopar, por exemplo. Para se obter esses valores, é realizada uma estimativa considerando modelos teóricos. Assim, a temperatura média no cilindro, em uma posição qualquer em função do ângulo do virabrequim, θ , é obtida pela equação (HEYWOOD, 2018)

$$T(\theta) = \frac{p(\theta) \cdot V(\theta) \cdot M_b}{m_{total/ciclo} \cdot \bar{R}} \quad (35)$$

onde $p(\theta)$ e $V(\theta)$ são a pressão e o volume no cilindro em função do ângulo do virabrequim, θ , M_b é a massa molecular dos gases queimados, em g/mol, $m_{total/ciclo}$ é a massa total dentro do cilindro, em g, e $\bar{R}$ é a constante universal dos gases ideais, ou seja, $\bar{R} \cong 8,31432 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$.

A pressão é obtida experimentalmente através de um sensor instalado no cabeçote do motor e o volume é obtido através da Eq. (8).

A massa molecular dos gases queimados é obtida de (HEYWOOD, 2018):

$$M_b = \frac{m_{RP}}{n_b} \quad (36)$$

onde m_{RP} é a massa da mistura queimada e não queimada por mol de O_2 na mistura e n_b é o número de mols do gás queimado.

As variáveis anteriores são obtidas através da reação estequiométrica, Eq. (32), e algumas manipulações algébricas, o que não será demonstrado nesse texto, mas pode ser consultado em Heywood (2018), obtendo-se as seguintes relações

$$m_{RP} = 32 + 4\phi\zeta \left(1 + \frac{8}{4+y}\right) + 28,16 \cdot 3,773 \cdot \zeta \left(1 - \frac{4z}{8+2y}\right) \quad (37)$$

$$n_b = \phi\zeta \left(1 - \frac{4}{4+y}\right) + 1 + 3,773\zeta \left(1 - \frac{4z}{8+2y}\right) \quad (38)$$

$$\zeta = \frac{2}{2 - \left(\frac{4z}{4+y}\right)(1-\phi)} \quad (39)$$

Por sua vez, a massa total dentro do cilindro por ciclo é dada por

$$m_{total/ciclo} = m_{ar/ciclo} + m_{cp/ciclo} + m_{cs/ciclo} + m_{EGR/ciclo} + m_{rg/ciclo} \quad (40)$$

onde $m_{ar/ciclo}$ é a massa de ar na admissão $m_{cp/ciclo}$ e $m_{cs/ciclo}$ são as massas de combustível primário e secundário, respectivamente, $m_{EGR/ciclo}$ é a massa devido ao sistema EGR, quando utilizado e $m_{rg/ciclo}$ é a massa de gás residual no fechamento da válvula de admissão. OBS.: todas as massas são obtidas a cada ciclo.

Nesse trabalho, $m_{EGR/ciclo} = 0$ pois não se utilizou o sistema de gases de recirculação. A massa de gás residual no fechamento da válvula de admissão é estimada através da equação

$$m_{rg/ciclo} = \frac{p_{EVC} \cdot V_{EVC} \cdot M_b}{T_{GE} \cdot \bar{R}} \quad (41)$$

onde p_{EVC} e V_{EVC} são, respectivamente, a pressão e o volume no cilindro no fechamento da válvula de exaustão e T_{GE} é a temperatura média dos gases na exaustão obtidas experimentalmente por um termopar.

A pressão no fechamento da válvula de exaustão é aproximadamente igual à pressão atmosférica, $p_{EVC} \cong p_{atm} = 101325 \text{ Pa}$, e o volume da câmara de combustão nesse instante é igual ao volume de PMS, $V_{EVC} = V_{PMS} = 23,22^\circ$.

3.2 Combustíveis

Nessa seção são apresentadas sucintamente as características principais dos combustíveis utilizados no desenvolvimento desse trabalho, começando como o diesel e, posteriormente, com o HVO e o biogás que, pela sua natureza renovável e por proporcionar reduções nos gases de efeito estufa, esses bicomcombustíveis produzidos por vegetais (HVO) e resíduos biológicos (biogás) são vantajosos em relação aos combustíveis fósseis (BOGGAVARAPU e RAVIKRISHNA, 2013).

3.2.1 Diesel

É o combustível mais utilizado no Brasil no setor de transporte, como apresentado na Figura 3. Trata-se de uma mistura de hidrocarbonetos, cuja composição varia de acordo com as especificações técnicas de cada país, mas em geral sendo descrito de forma simplificada como $C_{12}H_{26}$, podendo possuir também átomos de enxofre em sua composição.

No Brasil é comercializado o diesel S10, cujo número 10 refere-se à quantidade de enxofre em sua composição em partículas por milhão. Além disso, é adicionado biodiesel ao diesel veicular cujo teor, a partir de setembro de 2021, foi fixada em 10% (CNN BRASIL, 2021).

O número de cetano, que representa o tempo decorrido entre o início da injeção do combustível e o início da combustão, é uma das características mais importantes desse combustível, haja visto que descreve a qualidade de ignição, influenciando na partida do motor, no funcionamento sob carga e nas emissões (BRUNETTI, 2012), sendo este um parâmetro importante na análise de substituição do diesel por combustíveis renováveis.

A Tabela 1 apresenta as principais características do óleo diesel utilizado nos testes experimentais realizados no Laboratório de Máquinas Térmicas (LMT) da UNIFEI no projeto ROTA 2030. Seu aspecto é límpido e isento de impurezas e sua coloração varia de incolor a amarelo (DA COSTA, 2021).

Tabela 1 – Propriedades físico-químicas do diesel S10

Propriedade	Valor
C [% em massa]	85,33
H [% em massa]	13,12
O [% em massa]	1,55
S [% em massa]	0,001
Fórmula química aproximada	$C_{14,22}H_{26,24}O_{0,19}$
PCI [MJ/kg]	41,03
Número de cetano [--]	50,5
Massa específica a 20°C [kg/m ³]	846,6
Viscosidade cinemática a 40°C [mm ² /s]	2,88

Fonte: Da Costa *et al.* (2022).

3.2.2 HVO

Também conhecido como diesel verde, diesel renovável ou, ainda, HEFA (*Hydroprocessed Esters and Fatty Acids*, do inglês) (EC, 2019), o óleo vegetal hidrogenado, cuja sigla HVO é proveniente do inglês *Hydrotreated Vegetable Oil*, trata-se de um combustível obtido a partir da hidrogenação de óleos vegetais, como de soja, girassol, palma e de gordura animal, possuindo fórmula química aproximada C_nH_{2n+2} (DIMITRIADIS *et al.* 2018).

O HVO é um hidrocarboneto parafínico de cadeia linear, sem a presença de oxigênio e enxofre e com alto número de cetano e poder calorífico substancialmente maior que o do etanol, o que contribui para aplicação em motores de combustão interna de ignição por compressão, contribuindo para a redução das emissões de poluentes (EC, 2019; AATOLA *et al.*, 2009; DIMITRIADIS *et al.* 2018).

Na Tabela 2 são apresentadas as principais características do HVO, tipo NEXTBTL produzido pela empresa Neste Oil, utilizado nos testes experimentais realizados no LMT-UNIFEI durante o projeto ROTA 2030.

Comparando-se as propriedades para o diesel e para o HVO apresentadas nas Tabelas 1 e 2, respectivamente, nota-se que o poder calorífico do HVO é superior ao diesel convencional devido à maior presença de hidrogênio em sua composição. Além disso, devido à redução na sua viscosidade cinemática e, consequentemente, no seu poder de lubrificação, devido à ausência de enxofre e oxigênio em sua composição,

torna-se necessária a utilização de um aditivo lubrificante a fim de proteger o sistema de injeção. Uma comparação mais extensa das propriedades do diesel comercial, no caso o EM 590, e o HVO podem ser obtidas em Dimitriadis *et al.* (2018).

Tabela 2 – Propriedades físico-químicas do HVO

Propriedade	Valor
C [% em massa]	84,60
H [% em massa]	15,39
O [% em massa]	0,00
S [% em massa]	0,00
Fórmula química aproximada	C ₁₄ H ₃₀
PCI [MJ/kg]	44,10
Número de cetano [--]	76,3
Massa específica a 20°C [kg/m ³]	780,0
Viscosidade cinemática a 40°C [mm ² /s]	2,82

Fonte: Da Costa *et al.* (2022).

Na Europa, o uso do HVO puro ou misturado ao diesel fóssil, é regulamentado pela norma CEN/TS 15940. Por sua vez, nos EUA sua utilização é permitida mesmo sem uma regulamentação específica, desde que atenda à norma ASTM D975.

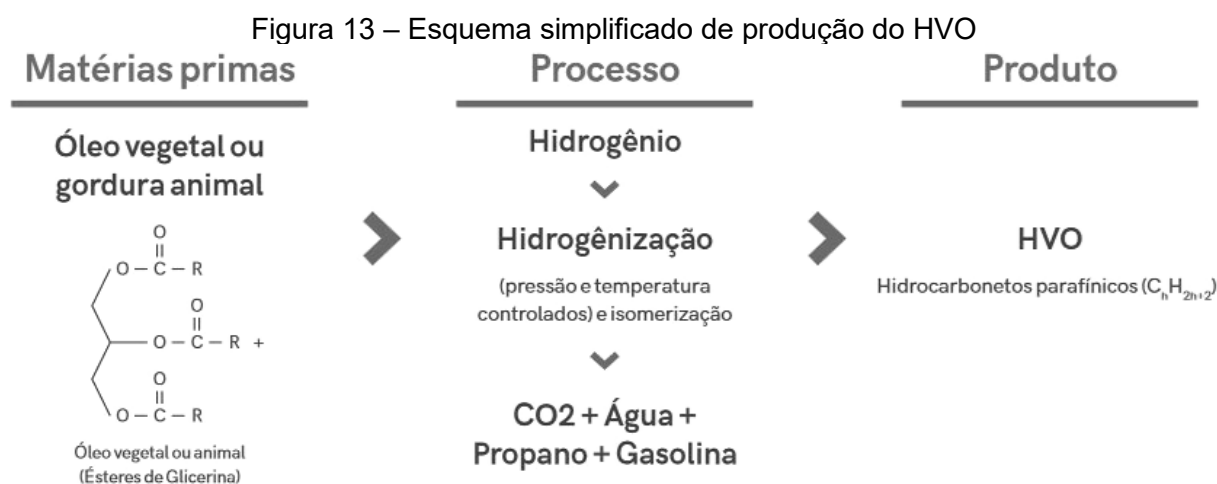
No Brasil, sua regulamentação está em andamento pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) através da Política Nacional de Biocombustíveis (RenovaBio) que visa a expansão do uso de biocombustíveis na matriz energética brasileira (ANP, 2020). Já em 2021, a ANP apresentou uma regulamentação que estabelece as especificações para o diesel verde, em relação ao seu controle de qualidade, seguindo normas ABNT, ASTM e/ou EN ISO (ANP 2021).

Além disso, em novembro de 2021, foi anunciada a construção da primeira biorrefinaria em território nacional, pelas empresas Vibra Energia e Brasil BioFuels, para produção de HVO com 100% de óleo vegetal, cujo início de produção está previsto para o ano de 2025 (VIBRA ENERGIA, 2021). Pelo mundo, algumas empresas que produzem e comercializam HVO são: Neste (Finlândia); REG Synthetic Fuels, LLC (EUA); ENI (Itália); UPM Biofuels (Finlândia); Diamond Green Diesel (EUA).

Segundo a Greenea, empresa de consultoria e corretagem para o mercado de matéria-prima à base de resíduos e biocombustíveis e que atua em 50 países, há uma estimativa de aumento significativo para a produção de HVO em todo o mundo até o

ano de 2025, podendo ter sua produção aproximadamente triplicada tanto na União Europeia (de 3,5 para 11,3 milhões de toneladas) quanto na Ásia (de 1,64 para 5 milhões de toneladas) e mais que sextuplicada nos EUA (1,9 para 12,6 milhões de toneladas) em relação a 2020, como mostra a Figura 14 (GREENEA, 2021).

Como mencionado anteriormente nesse texto, o HVO é produzido pela hidrogenação de óleos vegetais e de gordura animal. A tecnologia para produção desse combustível renovável consiste em duas etapas, uma de hidrogenação do triglicerídeo presente na matéria-prima e, posteriormente, em uma etapa de isomerização catalítica que leva a uma conversão que produz hidrocarbonetos semelhantes aos presentes no diesel convencional (DIMITRIADIS *et al.*, 2018). A Figura 13 apresenta de forma simplificada esse processo de produção.

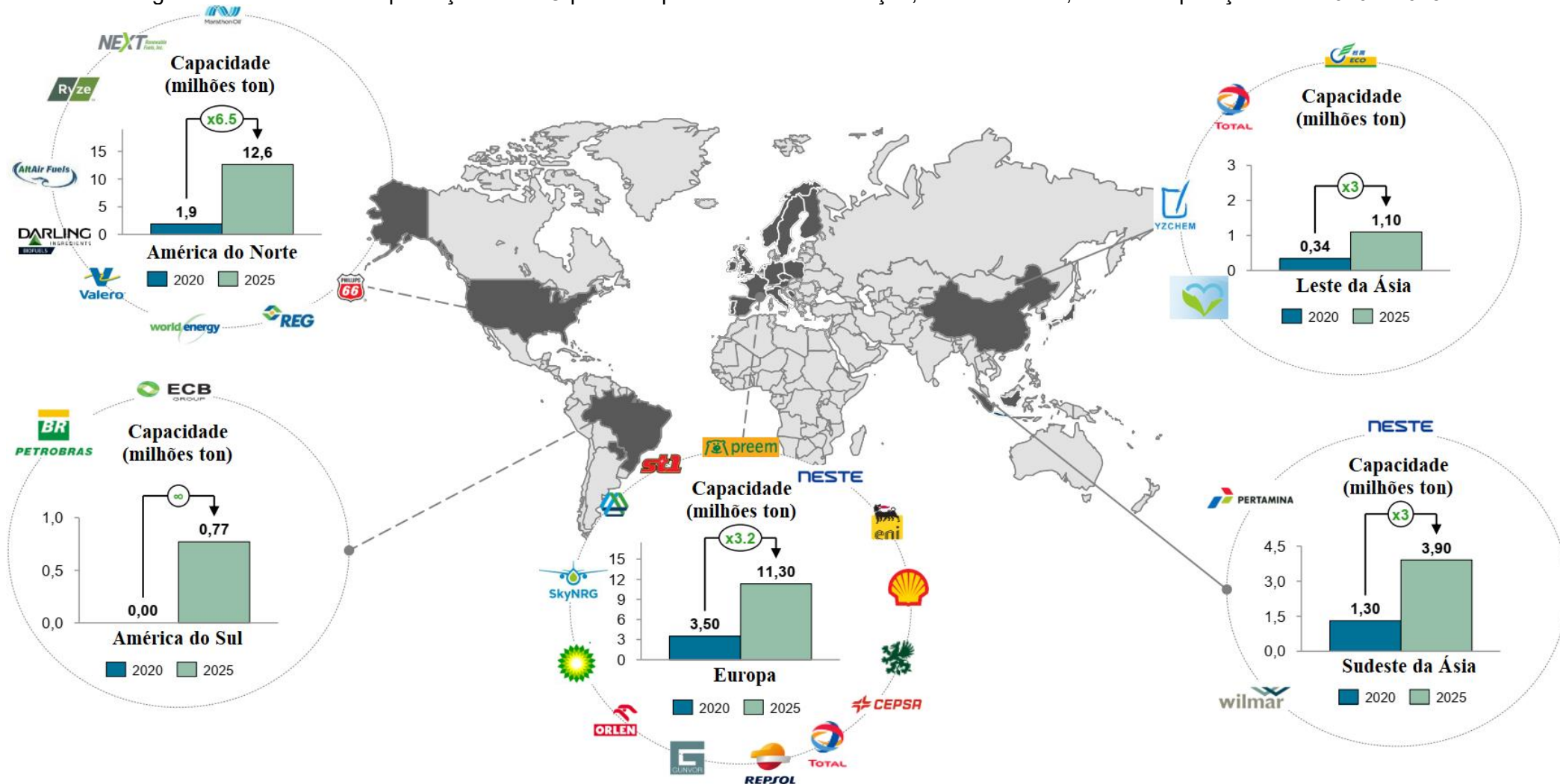


Fonte: Adaptado de Souza (2020).

Segundo Veriansyah *et al.* (2012), a tecnologia de hidrocessamento de triglicerídeos naturais em hidrocarbonetos produz um diesel renovável com maior densidade energética, menor emissão de óxido de nitrogênio e melhor estabilidade à oxidação quando comparado aos biodieseis sintetizados por transesterificação.

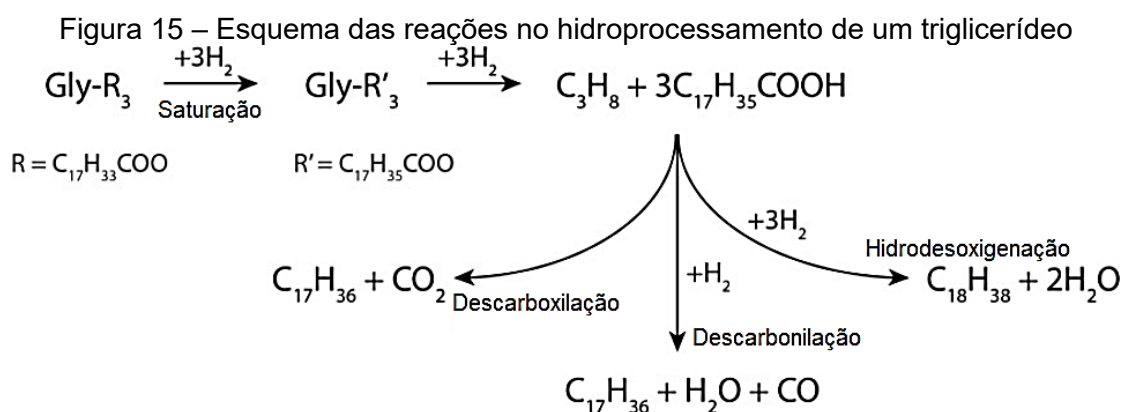
Outra vantagem é a possibilidade de se utilizar esse tipo de produção de diesel renovável nas infraestruturas das refinarias de petróleo já existentes, o que pode contribuir com a redução do investimento de capital inicial para a planta de produção (VERIANSYAH *et al.*, 2012), haja visto que as mesmas utilizam o processo de hidrotratamento a fim de remover contaminantes como enxofre, nitrogênio, anéis aromáticos condensados e metais (CAVALCANTI *et al.*, 2022).

Figura 14 – Estimativa de produção de HVO puro e coprocessado em execução, ou anunciados, e sua comparação entre 2020 e 2025



Fonte: Adaptado de Greenea (2021).

Ainda, segundo Cavalcanti *et al.* (2022), no processo de produção do HVO, a matéria-prima reage com o hidrogênio, juntamente com um catalisador que remove o oxigênio, sob altas pressão (5 a 20 MPa) e temperatura (300 a 400 °C) a fim de alterar a composição química, transformando as moléculas de triglicerídeos em hidrocarbonetos parafínicos. Durante esse processo há três etapas mais importantes: a remoção de oxigênio, denominada hidrodesoxigenação (HDO), remoção de monóxido de carbono e água, denominada descarbonilação (DCN) e a remoção do dióxido de carbono, denominada descarboxilação (DCX) (Hilbers *et al.*, 2019). A Figura 15 apresenta esses três processos, bem como a etapa de saturação do triglicerídeo de onde são obtidos ácidos graxos livres e propano.



Fonte: Adaptado de Hilbers *et al.* (2019).

O óleo vegetal hidrogenado produzido pela Neste, denominado NExBTL é apresentado na Figura 16, assim como a comparação de sua queima com a queima do diesel convencional, de onde é possível observar a redução nas emissões.

Figura 16 – HVO produzido pela Neste e sua queima comparada com o diesel convencional



Fonte: Adaptado de Honkanen e Dörr (2019).

Segundo Aatola *et al.* (2008), em comparação com outros biocombustíveis produzidos pelo processo de transesterificação de óleos vegetais, o HVO possui benefícios em relação à disponibilidade de volume e preço de matéria-prima e uma maior qualidade do produto gerado, porém apresenta desvantagens em relação ao preço relacionado ao investimento para o processo de produção. Comparando com os diesel renováveis produzidos por gaseificação e Fischer-Tropsch, o HVO perde em relação à disponibilidade e ao preço da matéria-prima, mas mantém a qualidade do produto produzido utilizando menor custo na planta de produção.

3.2.3 Biogás

O biogás é o nome dado a uma mistura de gases, em maiores quantidade para metano (CH_4) e gás carbônico (CO_2), podendo ainda possuir em sua composição traços de sulfeto de hidrogênio (H_2S), vapor de água, amônia e de outros gases. Sua produção é feita a partir da decomposição anaeróbia de matéria orgânica, como restos de alimentos e resíduos vegetais e animais. Assim, por ser proveniente de diferentes tipos de matérias-primas e, ainda, dependendo do tipo de decomposição, a concentração dos gases que o compõe é variável (SUBRAMANIAN, 2017; KARIM, 2015; MATHIAS e MATHIAS, 2015; DAMYANOVA e BESCHKOV, 2020).

Em termos práticos, considera-se apenas a concentração de metano e dióxido de carbono. Segundo Igoni *et al.* (2008), estes gases variam nas proporções 55-75% para o CH_4 e 30-45% de CO_2 . A Tabela 3 apresenta a composição do biogás proveniente de diferentes matérias-primas.

Tabela 3 – Composição do biogás para diferentes matérias-primas

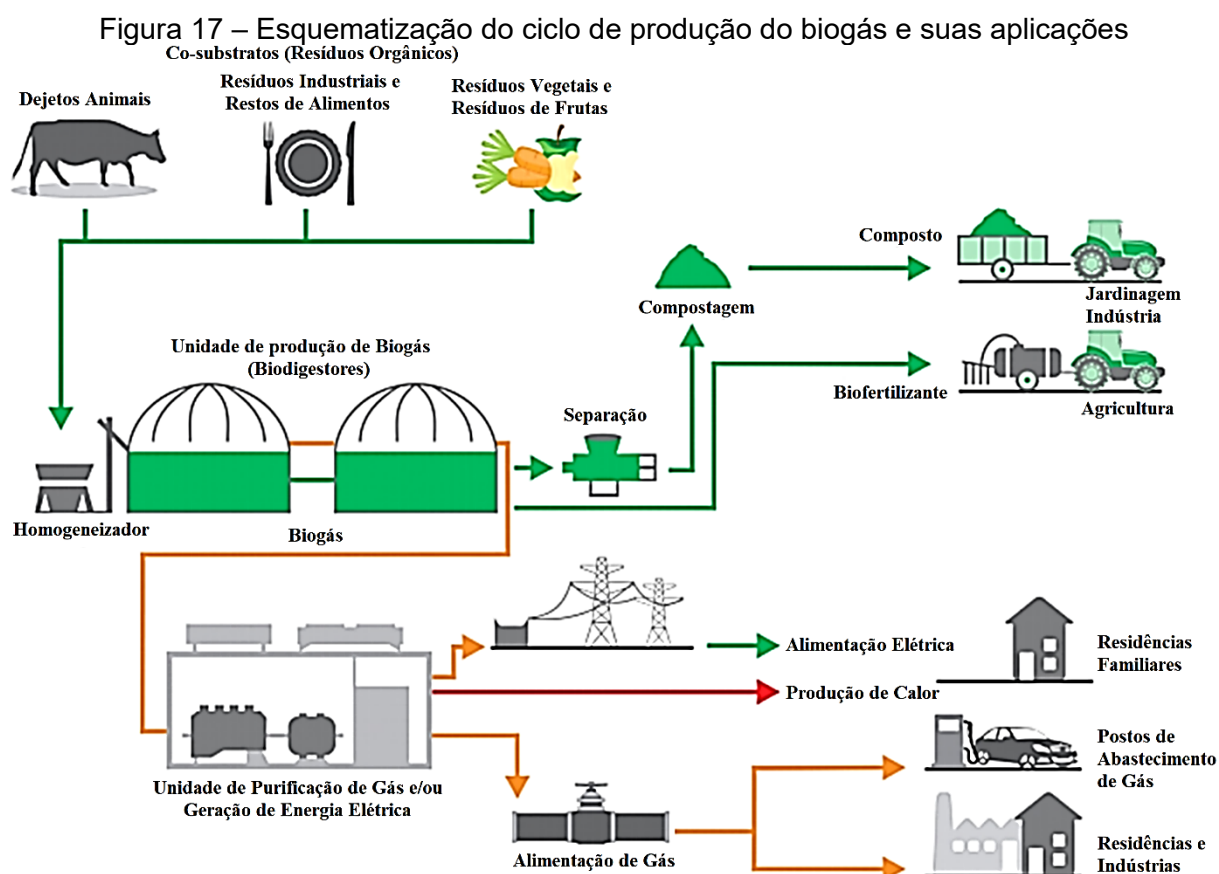
Matéria-Prima	% CH_4
Resíduos de bovinos	55
Resíduos de suínos	65
Resíduos de aves	70
Resíduos sólidos municipais	60
Palha	51
Silagem de Grama	52
Sementes de <i>Jatropha curcas</i>	66,5
Sementes de <i>pongamia pinnata</i>	62,5

Fonte: Subramanian (2017).

Para Karim (2015), a utilização de resíduos orgânicos para a produção de um gás combustível, e outros subprodutos economicamente úteis, como fertilizantes, traz benefícios tanto econômicos quanto ambientais. Destaca-se no fator ambiental, que os resíduos utilizados como matéria-prima para produção do biogás são responsáveis por grande parte da emissão de metano, gás extremamente nocivo ao meio ambiente. Como descreve Beschkov (2021), o metano possui um efeito estufa 25 vezes mais forte que o dióxido de carbono, ou seja, seu emprego para a produção de um combustível destinado à produção de energia é de grande relevância.

Além de ser utilizado como um combustível renovável que, em comparação com o biodiesel e o bioetanol, é o mais simples, pode-se converter o biogás em outros produtos, como combustíveis leves e produtos químicos.

A Figura 17 esquematiza o ciclo de produção do biogás e algumas possíveis aplicações.

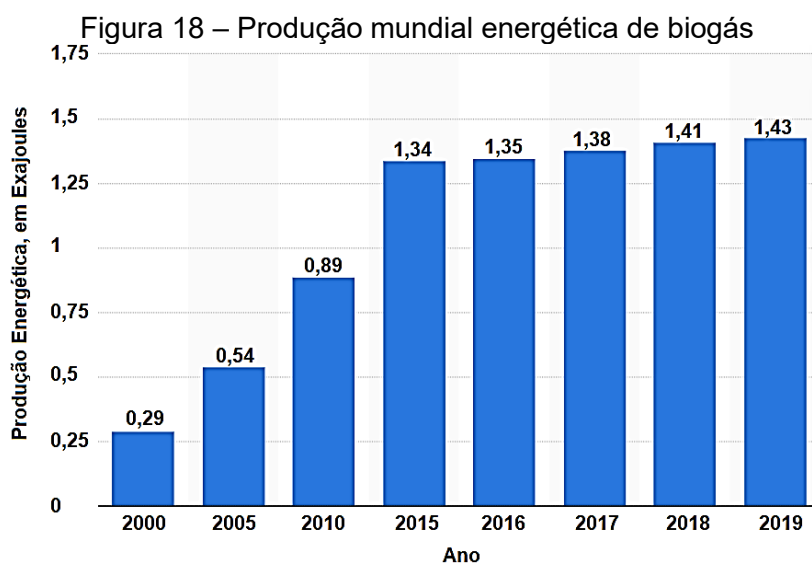


Fonte: Adaptado de Corrêa (2020).

Segundo Beschkov (2021), a popularização da produção do biogás deu-se na primeira metade do século XX, especialmente após o crescimento do preço do petróleo e do gás nos anos 70. Atualmente, países europeus e da América do Norte

tornaram a produção de biogás como uma ferramenta importante para a junção para o tratamento de resíduos, provenientes de diferentes fontes, com a produção de energia que é injetada para o desenvolvimento de atividades de algumas das fontes que são geradoras dos resíduos necessários para a produção do biogás. Por sua vez, em países em desenvolvimento, nos continentes asiático e africano, sua importância está mais relacionada ao desenvolvimento de técnicas acessíveis para a produção de biogás em baixa escala em residências.

Beschkov (2021) relata que a produção global de energia a partir do biogás teve um crescimento de um pouco mais de 1 milhão de Terajoules entre os anos 2000 (280.000 TJ) e 2014 (1.300.000 TJ), tendo seu volume de produção em aproximadamente 59 bilhões de metros cúbicos em 2013, sendo quase 50% dessa quantidade produzida pela União Europeia. A Figura 18 apresenta a produção mundial energética de biogás de 2000 até 2019, em Exajoules ($1 \text{ EJ} = 1 \cdot 10^{18} \text{ J}$), observe que houve um aumento considerável, aproximadamente 493%, em quase 20 anos.



Fonte: Adaptado de Sönnichsen (2022).

No Brasil, a produção de biogás teve seu início juntamente com a crise do petróleo, ao final dos anos 70. Já no início dos anos 80 o Governo Federal estimulou, pelo Programa de Mobilização Energética, a construção de biodigestores em áreas rurais. No entanto, devido à falta de mão de obra especializada e problemas operacionais teve um abandono da tecnologia, que voltou a se tornar relevante nos anos 90 e 2000 devido a ser uma alternativa para redução dos gases de efeito estufa e programa de crédito de carbono, dando destaque ao Programa de Incentivo às

Fontes Alternativas de Energia Elétrica (PROINFA), de 2002 (MATHIAS e MATHIAS, 2015; REIS, 2020; ABIOGÁS, 2021).

A instituição da Política Nacional de Resíduos Sólidos, em 2010, que objetivou a gestão dos resíduos sólidos, bem como a resolução nº 482, de 2012, que autorizou a geração de energia elétrica a partir de alternativas renováveis para pequenos e médios produtores também forma importantes para produção do biogás nacional (MATHIAS e MATHIAS, 2015; REIS, 2020; ABIOGÁS, 2021).

Com a criação da ABiogás (Associação Brasileira de Biogás e Biometano) e do CIBiogás (Centro Internacional de Energias Renováveis), em 2013, deu-se início a um maior incentivo para produção de energia e combustível a partir do aproveitamento de resíduos. Nos dois anos subsequentes foi incentivado o projeto de utilização de biometano como alternativa aos combustíveis fósseis veiculares, resultando em uma redução de 3% no consumo dos combustíveis convencionais (REIS, 2020).

O programa RenovaBio (RENOVABIO, [s.d.]), já mencionado anteriormente, assim como para outros biocombustíveis, também contribuiu para o incentivo da utilização do biogás no setor de transporte. À época, estimou-se uma produção de 500 mil m³/dia de biometano em 2019 e de 32 milhões m³/dia de biometano em 2030, representando um crescimento considerável nos dez anos subsequentes.

Em 2020 foi criado o Projeto de Lei 2193/20 que prevê benefícios fiscais e financiamento do BNDES, a fim de incentivar a produção, pesquisa e utilização do biogás e do biometano, reduzindo assim o descarte de resíduos sólidos, no entanto até o primeiro semestre de 2022 o mesmo ainda não havia sido posto em votação (CÂMARA DOS DEPUTADOS, 2020).

Em março de 2022, o Governo Federal lançou um pacote de medidas para a produção e o uso sustentável do biometano, a fim de substituir combustíveis fósseis. Esse pacote é direcionado aos compromissos assumidos pelo Brasil na COP26.

No Programa Nacional do Biogás e do Biometano (ABiogás, 2021) podem ser encontradas, de forma mais detalhada, iniciativas nacionais e marco regulatório para o biogás, bem como os principais decretos estaduais. Também, em Data Sebrae – Biogás (2022) podem ser encontradas as principais Leis, decretos e convênios organizados por região e por estado.

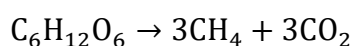
O cenário das plantas e o levantamento de dados da produção de biogás nacional está disponível online no site do CIBiogás (CIBiogás, 2022). Através da ferramenta online BiogasMap (BIOGASMAP, 2022), que apresenta de forma dinâmica

as plantas de biogás e biometano do país, que as regiões sudeste e sul concentram o maior número de plantas (sendo Minas Gerais e Paraná os maiores produtores), totalizando 811 em todo o território nacional e produziram 2,82 bilhões Nm³ de biogás no ano de 2021, o que representou um aumento de 16% de novas plantas e 10% no volume de produção de biogás (BIOGASMAP, 2022; CIBiogas, 2022).

Como mencionado anteriormente e esquematizado na Figura 17, os resíduos orgânicos passam pelo processo anaeróbico para a produção do biogás. Esse processo ocorre nos biodigestores e possui quatro etapas (ALVES, INOUE, BORGES, 2010; BESCHKOV, 2021; ABANADES *et al.*, 2022):

- Hidrólise: etapa onde as bactérias fermentativas hidrolisam a matéria orgânica em moléculas solúveis.
- Acidogênese: etapa onde há a conversão das moléculas solúveis provenientes da hidrólise em ácidos orgânicos, CO₂, álcoois etc.
- Acetogênese: etapa onde os produtos da acidogênese são convertidos em hidrogênio, dióxido de carbono e acetado.
- Metanogênese: etapa onde as bactérias denominadas metanogênicas quebram os ácidos orgânicos e há a formação de metano e dióxido de carbono.

A reação química que sintetiza todo o processo biológico e anaeróbico da biomassa para obtenção do biogás é descrita por (SUBRAMANIAN, 2017):



Há diversos tipos de biodigestores e, segundo Alves, Inoue e Borges (2010), sua escolha depende principalmente das condições locais de instalação, do tipo e disponibilidade do substrato orgânico, da experiência e conhecimento do construtor e da disponibilidade financeira do projeto. Sua forma de abastecimento pode ser em batelada (todo o resíduo orgânico é depositado de uma única vez, então fecha-se hermeticamente, o gás produzido é armazenado em um gasômetro ou na câmara digestora) ou contínua (os resíduos são adicionados de forma contínua, bem como a produção de biogás e biofertilizante também é contínua). China e Índia são os países com maior domínio tecnológico de construção dos biodigestores. Informações mais detalhadas sobre biodigestores podem ser consultadas em Freitas *et al.* (2019).

Segundo Beschkov (2021), o poder calorífico inferior do biogás está em torno de 20 e 32 MJ/m³. ALVES, INOUE e BORGES (2010) destacam que o poder calorífico depende da concentração do metano na mistura, o que dependerá do substrato e das

condições utilizados para sua produção, o que também é descrito por Da Costa *et al.* (2020). A Tabela 4 apresenta as propriedades de um biogás

O biogás possui propriedades antidetonantes melhoradas em relação a outros combustíveis renováveis, possuindo maior número de e menor velocidade de chama, reafirmando assim a boa utilização do biogás como combustível alternativo octano (DA COSTA *et al.*, 2020; GA e THA, 2020).

Tabela 4 – Propriedades físico-químicas do biogás

Propriedade	Valor
CH ₄ [% em volume]	64,96
CO ₂ [% em volume]	35,02
PCI [MJ/kg]	22
Número de octano [--]	130
Massa específica a 20°C [kg/m ³]	1,2
Temperatura de auto-ignição [°C]	650

Fonte: Da Costa *et al.* (2020).

3.3 Emissões de Poluentes

As maiores fontes de emissão de poluentes são os gases resultantes do processo de combustão de dispositivos que aproveitam a energia térmica liberada por esse processo (CARVALHO JR.; LACAVA, 2003).

Segundo Brunetti (2012), ao se analisar motores de combustão interna, é de suma importância analisar os produtos resultantes do processo de combustão, como descrito na Eq. (28), e designados por emissões àqueles que são nocivos ao meio ambiente e à saúde humana, por três aspectos:

- Avaliar a eficiência do processo de combustão, medindo as concentrações de gases como CO, CO₂, NO₂, NO etc.
- Avaliar os gases de combustão completa, a fim de determinar a vazão de um dos reagentes através do balanço de massa.
- Determinar a concentração de gases poluentes, limitados pelas legislações de emissões.

Ainda pela Eq. (28), vê-se que os produtos da combustão dependem do combustível utilizado, das condições de funcionamento do motor e da qualidade da mistura ar/combustível. A Figura 12 apresenta a variação da formação de poluentes

no processo de combustão em função do fator λ , ou seja, em relação à qualidade da mistura ar/combustível. Há diversos modelos na literatura para prever as emissões, obtidos através de estudos teóricos e, principalmente, a partir de dados experimentais.

Quando a combustão de um hidrocarboneto, constituído por átomos de carbono (C) e hidrogênio (H), é completa, o produto da combustão é composto por oxigênio (O_2), nitrogênio (N_2), dióxido de carbono (CO_2) e vapor de água (H_2O). Por sua vez, no processo de combustão real aparecerão, além dos componentes anteriores, monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos não-queimados (HC ou UHC), hidrogênio (H_2), óxido de nitrogênio (NO_x) e de enxofre (SO_x) e material particulado (PM) (MERKER *et al.*, 2012).

Visando o controle ambiental sobre as emissões de poluentes, a Europa criou normas EURO para esse controle. A Tabela 5 apresenta as variações das emissões de CO, HC, NO_x e PM para as normas EURO I a EURO VI considerando um veículo pesado. Pode-se observar que entre as normativas I e VI, tratam de reduções em 66,67% para o monóxido de carbono, 88,18% para os hidrocarbonetos, 95% para os óxidos de nitrogênio e 98,36% para os materiais particulados.

Segundo De Carvalho (2011), a poluição causada por veículos pode ser local (quando causa impacto em áreas no entorno do serviço de transporte, como as fuligens e poluentes que causam a chuva ácida ou o efeito *smog*) ou global (quando causa impactos o planeta, como os gases do efeito estufa, principalmente o CO_2).

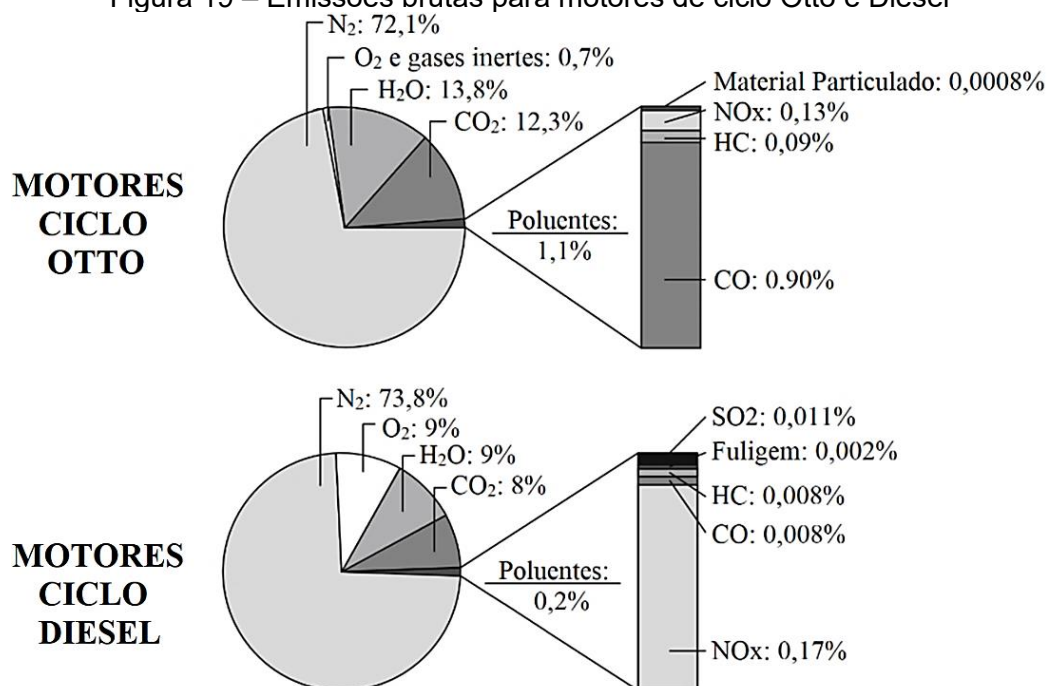
Tabela 5 – Normas EURO para controle de emissões de veículos pesados

Norma	CO [g/kWh]	HC [g/kWh]	NO_x [g/kWh]	PM [g/kWh]
EURO I	4,5	1,10	8,0	0,61
EURO II	4,0	1,10	7,0	0,15
EURO III	2,1	0,66	5,0	0,13
EURO IV	1,5	0,46	3,5	0,02
EURO V	1,5	0,46	2,0	0,02
EURO VI	1,5	0,13	0,4	0,01

Fonte: Adaptado de Delphi (2012).

A Figura 19 apresenta as emissões brutas, ou seja, sem o uso de catalisadores, em porcentagem volumétrica, para motores de ignição por centelha (ciclo Otto) e de ignição por compressão (ciclo Diesel).

Figura 19 – Emissões brutas para motores de ciclo Otto e Diesel



Fonte: Adaptado de Merker *et al.* (2012).

Na Tabela 6 são apresentados alguns efeitos nocivos para os principais gases emitidos por motores de combustão interna.

Tabela 6 – Alguns efeitos nocivos dos principais poluentes emitidos por MCIs

Poluente	Efeito(s) Nocivo(s)
CO ₂	Principal gás causador do efeito estufa.
CO	Atua no sangue reduzindo sua oxigenação, podendo causar morte após determinado período de exposição.
NO _x	Formação de dióxido de nitrogênio e na formação de <i>smog</i> fotoquímico e chuva ácida. É um precursor do ozônio.
HC	Combustíveis não queimados ou parcialmente queimados, formam o <i>smog</i> e compostos cancerígenos. É um precursor do ozônio.
PM	Pode penetrar nas defesas do organismo, atingir os alvéolos pulmonares e causar irritações, asma, bronquite e câncer de pulmão. Sujeira e degradação de imóveis próximos aos corredores de transporte.
SO _x	Precursor do ozônio, formando a chuva ácida e degradando vegetação e imóveis, além de provocar vários problemas de saúde.

Fonte: Adaptado de De Carvalho (2011).

De Carvalho (2011) mostra que no ano de 2005 no município de São Paulo, as concentrações de NO_x e material particulado/fuligem foram fortemente influenciadas

pela circulação de veículos pesados movidos à diesel, enquanto que as concentrações de CO e HC por automóveis e motocicletas (veículos de ciclo Otto).

3.3.1 Monóxido de Carbono

Pode-se observar, a partir dos gráficos apresentados na Figura 19, que as emissões de CO são em maiores quantidades provenientes de motores de ignição por centelha, isso deve-se ao fato de os mesmos operarem em regiões próximas à estequiométrica, do que por motores de ignição por compressão, que operam com excesso de ar (BRUNETTI, 2012).

Em motores de combustão interna, a formação do monóxido de carbono é devida à combustão incompleta, o que caracteriza uma perda de energia, ou seja, redução na eficiência do motor (BRUNETTI, 2012). A queima de combustíveis veiculares faz com que haja uma formação inicial de CO e, em seguida, a oxidação e CO em CO₂ (BRUNETTI, 2012; CARVALHO JR. e LACAVA, 2003).

3.3.2 Dióxido de Carbono

O dióxido de carbono não possui efeito direto na saúde humana, porém é o principal causador do efeito estufa e do aquecimento global, o que de forma indireta provoca danos à saúde humana e ambiental.

Segundo De Carvalho (2011), o setor de transporte é responsável por 20% das emissões globais de CO₂. No Brasil, o transporte coletivo é responsável por apenas 7% do total das emissões de CO₂, enquanto que os automóveis e veículos leves contribuem com metade das emissões desse poluente. Assim, de modo geral, nota-se que a busca por redução do consumo de combustível fóssil em motores de combustão interna, como a utilização de sistemas *dual-fuel*, e por sistemas que otimizam a eficiência térmica, mecânica e volumétrica no processo de combustão em motores é de grande importância.

Além disso, em uma comparação simples e direta, pode-se observar na Figura 19 que motores de ciclo Otto emitem cerca de 54% mais poluentes globais, CO₂, que os motores de ciclo Diesel.

3.3.3 Óxido de Nitrogênio

Os óxidos de nitrogênio (NO_x) referem-se à soma dos dois componentes de nitrogênio mais emitidos em processos de combustão, o monóxido de nitrogênio (NO), em aproximadamente 90%, e o dióxido de nitrogênio (NO₂). Em contato com a atmosfera, rapidamente há a transformação de NO para NO₂. Por sua vez, em contato com vapor de água há formação do ácido nítrico, presente na chuva ácida. Além disso, junto com raios ultravioletas, o dióxido de nitrogênio forma o ozônio e o *smog* (névoa marrom-amarelada que aparecem sobre áreas urbanas em dias ensolarados), ambos prejudiciais à saúde dos seres vivos (BRUNETTI, 2012; CARVALHO JR. e LACAVA, 2003).

Da Figura 19 é possível apontar que esses óxidos correspondem a maior parcela das emissões de poluentes locais em motores Diesel e são cerca de 31% maiores que as emitidas por motores Otto.

3.3.4 Hidrocarbonetos Não Queimados

Assim como na formação de CO, a formação de HC também está intimamente relacionada à combustão incompleta. Logo, são emitidos principalmente por motores de ciclo Otto, como apresentado na Figura 19, mais de 10 vezes em comparação com motores de ciclo Diesel. Eles englobam todos os hidrocarbonetos que não foram oxidados na câmara de combustão, seja pela falta de temperatura suficiente para completar a reação (junto às paredes da câmara de combustão) seja por estar em regiões onde a mistura ar/combustível é excessivamente rica ou pobre (MERKER et al. 2012; BRUNETTI, 2012; SUBRAMANIAN, 2017).

3.3.5 Material Particulado

Para Carvalho Jr. e Lacava (2003), as partículas estão entre os poluentes que apresentam maiores riscos ao meio ambiente e à saúde humana, pois aumentam as taxas de reação na atmosfera, reduzem a visibilidade e alteram os níveis de radiação solar que atinge o solo, atacam os pulmões e são cancerígenas.

O material particulado e a fuligem (nome dado ao material particulado com tamanho inferior a $0,1 \mu\text{m}$) também são provenientes, em sua maioria, de uma combustão incompleta.

Em motores de ignição por compressão, a emissão de material particulado (ou fuligem como apresentado na Figura 19) corresponde a cerca de 2,5 vezes mais que a emissão em motores de ignição por centelha, como apresentado na Figura 19.

3.3.6 Compostos de Enxofre

Os compostos de enxofre são formados a partir da reação do enxofre presente no combustível. Sua concentração será função da porcentagem que o combustível possui de enxofre (logo, combustíveis com menos teor de enxofre são menos poluentes) e da razão ar-combustível. Juntamente com os NO_x também é responsável pela chuva ácida (BRUNETTI, 2012).

Na Figura 19 pode-se notar, através da emissão de SO_2 , que o enxofre está diretamente ligado à utilização do diesel em motores de combustão interna.

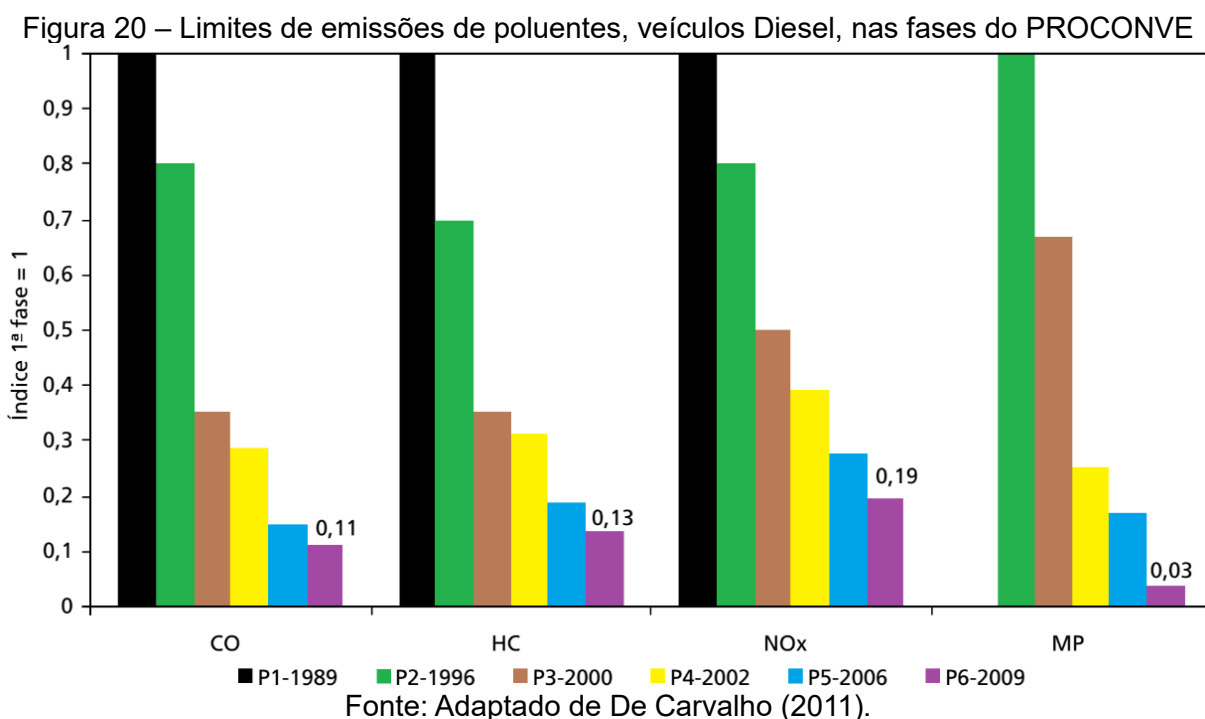
3.3.7 Controle de Emissões em Motores Diesel

De acordo com De Carvalho (2011), no Brasil as políticas de mitigação de emissões veiculares baseiam no estabelecimento de limites máximos de emissões, similar às normas EURO, apresentadas na Tabela 5, na Europa e em medidas para redução de teores de compostos químicos poluidores nos combustíveis, como a redução do teor de enxofre no diesel, e na mistura de combustíveis fósseis com combustíveis renováveis, como a adição de etanol na gasolina e de biodiesel no diesel fóssil.

Ainda referente aos combustíveis, àqueles que possuem maior fração de componentes com baixo ponto de ebulição trarão melhor formação na mistura e consequente redução na emissão de fumaça. Ademais, o aumento do número de cetano do combustível reduzirá o atraso de ignição, o gradiente de pressão e a pressão máxima da combustão, implicando em redução nas emissões de NO_x e HC quando os motores funcionam a cargas baixas e médias (BRUNETTI, 2012).

O Programa de Controle de Poluição do Ar por Veículos Automotores, o PROCONVE, lançado em 1986 é uma dessas políticas de mitigação de emissões

veiculares. Especificamente para motores de ciclo Diesel, desde a implementação desse programa, houve grande redução nas emissões dos principais poluentes atmosféricos, como pode ser observado na Figura 20, que apresenta os dados em comparação com os valores de emissões na primeira fase do PROCONVE, na cor preta, nota-se que as emissões de CO, HC, NOx e MP reduziam em 20% da quantidade observada na fase 1, destacando-se a redução nas emissões de material particulado (MP) que, na fase 6, encontra-se inferior a 5%.



A redução das emissões de fumaça (material particulado), do monóxido de carbono e de hidrocarbonetos não queimados pode ser conseguida ao se aperfeiçoar os processos de formação da mistura ar/combustível e de combustão, contribuindo também para melhoria no desempenho e da eficiência do motor. No entanto, a melhoria no processo de combustão eleva os níveis de óxidos de nitrogênio. De forma adversa, ao se reduzir a razão de compressão, o avanço da injeção ou restringindo o ar na admissão, reduzem-se as emissões de NOx, mas elevando-se os outros níveis de poluentes (BRUNETTI, 2012; HEYWOOD, 2018).

Logo, os projetos de motores de combustão interna devem buscar a utilização de um ponto em comum que atenda os limites de emissões dos poluentes mencionados, NOx e demais, e mantenha características de desempenho e eficiência do motor em níveis adequados.

Outra técnica utilizada que contribui para a redução na emissão de NO_x é a utilização de sistemas EGR (*Exhaust Gas Recirculation*, do inglês), ou seja, recirculação dos gases de exaustão. Contudo, haverá redução na temperatura máxima do ciclo e, além disso, quando o motor funciona em plena carga haverá também redução na eficiência e aumento nas emissões de CO (BRUNETTI, 2012; REŞİTOĞLU, ALTINIŞIK, KESKIN, 2015; HEYWOOD, 2018).

Para Brunetti (2012), regular o motor em baixos níveis de emissão de NO_x e, através de um catalisador de oxidação instalado no sistema de escapamento do veículo para reduzir os níveis de CO e HC, é o melhor a ser feito. Além disso, a instalação de um filtro após esse catalisador pode contribuir para uma redução e 70% nas emissões de material particulado.

4 METODOLOGIA EMPREGADA NA SIMULAÇÃO DE MCI'S

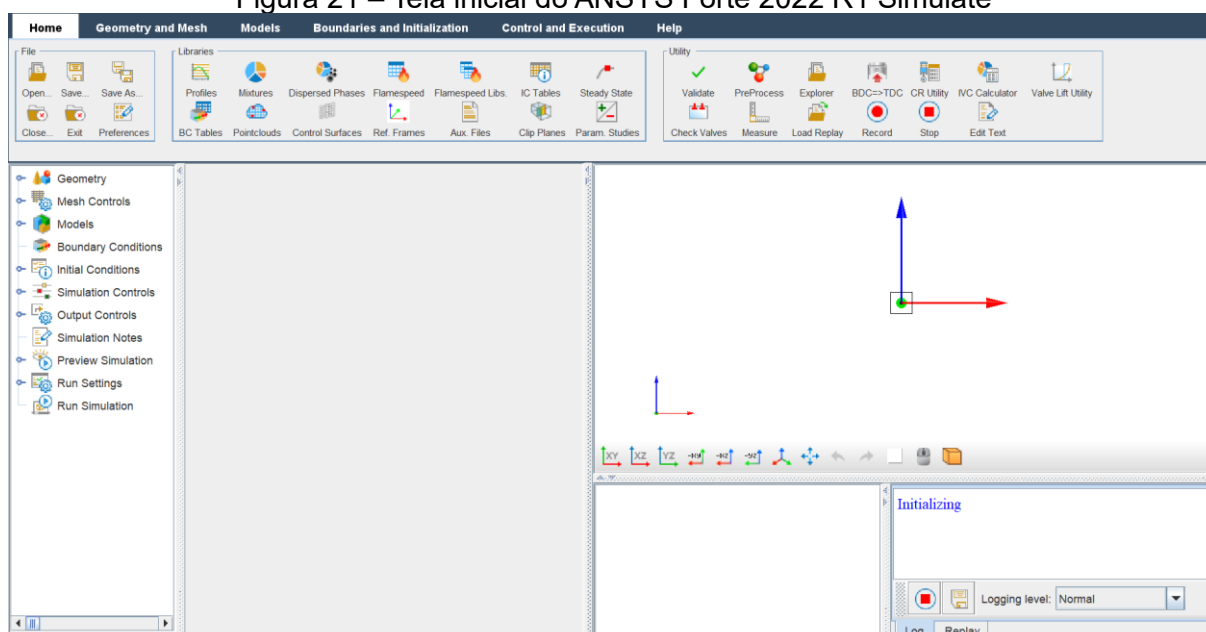
Essa seção é dedicada, de modo geral, aos conceitos relativos à simulação computacional de motores de combustão interna, em especial aos de ciclo diesel puro e *dual-fuel* utilizando o módulo Forte, presente no software ANSYS, cuja licença vitalícia “Campus Solution” foi adquirida pela UNIFEI em 2020.

4.1 Visão Geral do Ansys Forte

O módulo Forte, presente no software ANSYS faz parte do pacote *Reaction Design*, adquirido pela ANSYS no ano de 2014, onde também se encontram o Chemkin-Pro e o Energico, além de uma biblioteca de modelos de combustíveis.

O Forte é empregado para simular tridimensionalmente motores de combustão interna utilizados em veículos. Para tal, são resolvidas as equações de conservação (massa, quantidade de movimento linear e energia) juntamente com modelos de turbulência, acoplado à cinética química do processo de reação do combustível e a modelos para *spray* e vaporização do combustível de forma eficiente através da utilização de malhas adaptativas (ANSYS, 2022). A Figura 21 apresenta a tela inicial do ANSYS Forte 2022 R1 Simulate.

Figura 21 – Tela inicial do ANSYS Forte 2022 R1 Simulate



Fonte: Elaborada pelo Autor (2022).

Como apresentado na Figura 21, o Forte segue um passo a passo intuitivo para construção do projeto de simulação, desde a inserção da geometria 3D, em *Geometry*, até a execução da simulação, em *Run Simulation*. Nas seções seguintes cada passo a passo será explicado, bem como a teoria, quando necessária, para construção dos projetos empregados neste trabalho de mestrado. Para tal, e para obtenção de informações mais detalhadas, foram utilizados o Guia de Usuário e o Manual Teórico do ANSYS Forte presentes em ANSYS (2022).

De forma geral, a modelagem e a simulação do processo de combustão em um MCI por compressão compreendem, como condições de contorno para o movimento do ângulo do virabrequim, os intervalos que variam desde o fechamento da válvula de admissão (IVC – *Intake Valve Closure*, do inglês) até a abertura da válvula de exaustão (EVO – *Exhaust Valve Opening*, do inglês).

O motor monocilindro considerado no projeto é o modelo Buffalo BFDE 10.0, apresentado na Figura 22, e cujas informações e características principais estão descritas na Tabela 7, juntamente com algumas informações relevantes do injetor.

Figura 22 – Motor Buffalo modelo BFDE 10.0



Fonte: Buffalo (2017).

Em relação ao injetor, para a realização das simulações do processo de combustão utilizando um setor, recomenda-se seguir um padrão relacionado com a quantidade de furos que ele possui. Nesse caso, como descrito na Tabela 7, o setor utilizado será de 90° ($360^\circ/4$), correspondendo a injeção a partir de um dos furos do injetor, como será descrito na Seção 4.2, relativa à construção da geometria.

Tabela 7 – Algumas especificações técnicas do motor Buffalo BFDE 10.0

Especificação	Valor
Tipo	4 tempos refrigerado a ar
Potência máxima	10 cv
Volume deslocado	418 cm ³
Diâmetro × Curso do pistão	86 × 72 mm
Comprimento da biela	118 mm
Razão de compressão	19,0:1
Número de válvulas	Admissão (1) e Exaustão (1)
Tipo de injeção	Mecânica
Número de furos do injetor	4
Ângulo de <i>Spray</i>	150°
Ângulo de Injeção	-22°±1

Fonte: Adaptado de Buffalo (2017) e Da Costa (2022).

4.2 Geometria

Escolheu-se o software SolidWorks® para construir o modelo 3D da câmara de combustão do motor, a partir de informações geométricas do motor real, apresentado na Figura 23 considerando algumas aproximações.

Figura 23 – Imagens reais do cabeçote do motor, do pistão, do injetor e das válvulas

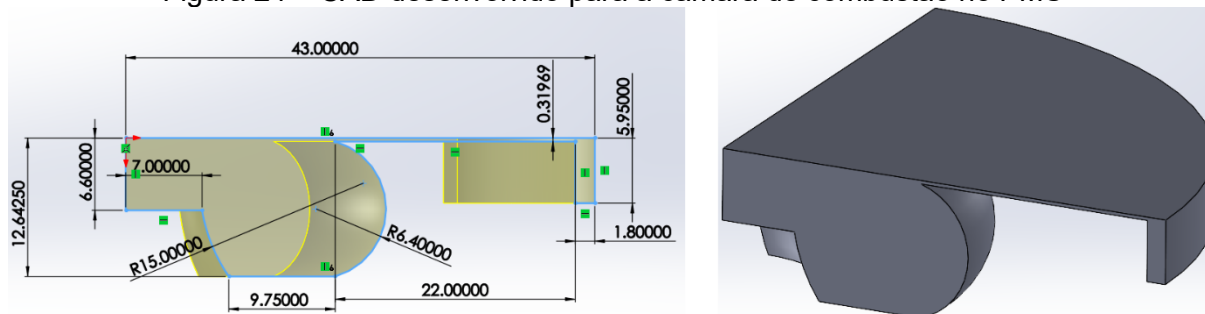


Fonte: Elaborado pelo Autor (2017).

Modelou-se, de forma aproximada, a câmara de combustão para o pistão no ponto morto superior (PMS), pois, a partir dessa posição, o Forte descreve, obtém e calcula o volume deslocado para o setor a partir da movimentação da malha computacional entre o PMS e o PMI. Considerando a condição de periodicidade e os 4 furos do injetor, para simplificação e realização de simulações com menor custo computacional, considerou-se uma análise para o setor de 90°.

A Figura 24 apresenta a geometria modelada, para as vistas frontal e isométrica. Vale ressaltar que a geometria é modelada para ser encaixada em 1/4 da parte superior da câmara de combustão do motor. As medidas foram obtidas de forma aproximada do pistão apresentado na Figura 23, do motor Buffalo BFDE 10.0.

Figura 24 – CAD desenvolvido para a câmara de combustão no PMS



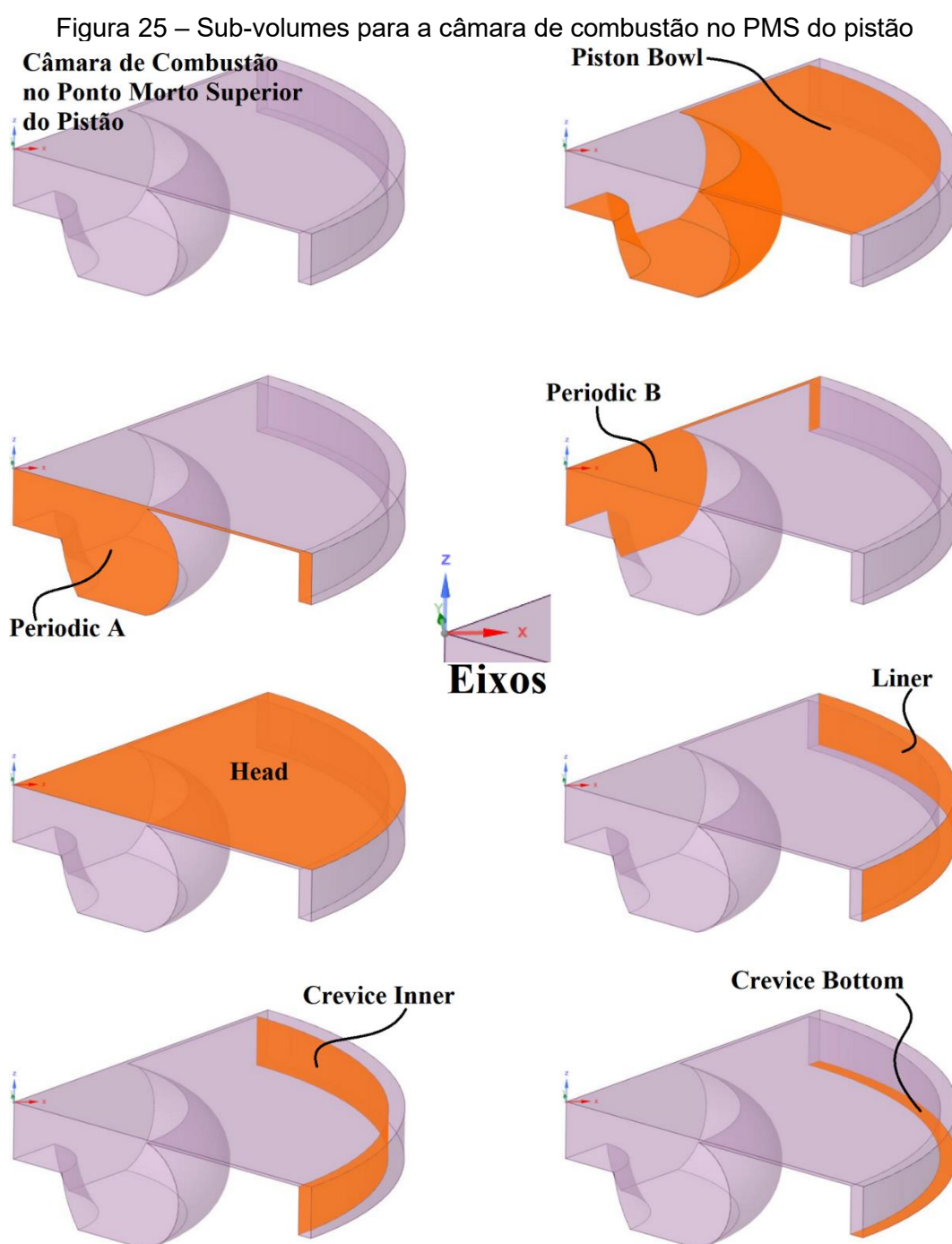
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Posteriormente à criação da geometria 3D, a mesma foi exportada para o ambiente SpaceClaim, do ANSYS, para criação da malha computacional base e em arquivo no formato STL, importados para o Forte. Nessa etapa, foram definidos os sub-volumes da geometria, considerando sua utilização nas condições de contorno e iniciais. Além disso, foram também definidas a forma da construção da malha base para as posições do pistão nos pontos mortos superior e inferior.

A Figura 25 apresenta o modelo e os sub-volumes construídos no SpaceClaim destacados e nomeados na forma usual para serem usados no ANSYS Forte. Por *default* do software empregado nas simulações, os eixos cartesianos (x , y , z) foram definidos como: x positivo voltado para a direita, z positivo voltado para a parte superior e y formando um ângulo reto com os outros dois eixos.

Os sub-volumes estáticos são “head”, “liner”, “periodic A” e “periodic B”, por sua vez os sub-volumes “piston bowl”, “crevice inner” e “crevice bottom” movimentam-se na direção z negativa, ou seja, para baixo, de forma que os sub-volumes “liner”, “periodic A” e “periodic B”, mesmo estáticos, aumentam seu comprimento (direção z),

chegando até o volume da câmara de combustão no PMI. Assim, a partir dos volumes calculados no PMS e no PMI, obtém-se a razão de compressão (RC) do motor pela Eq. (3), que deve ser a mesma apresentada na Tabela 7. A ferramenta “CR Utility” pode ser empregada para verificar o valor da razão de compressão antes da simulação. Porém, ao finalizar a simulação, os volumes no PMS e no PMI, bem como a RC, são recalculados e fornecidos em um arquivo no formato CSV, denominado “Engine Summary”, que também contém outras informações relevantes sobre o motor.



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

4.3 Malha

A malha é construída a partir do modelo 3D apresentado na Figura 25. Cada superfície será facetada (transformado em elementos em cada uma das superfícies) a fim de se obter um perfil de linhas para construção da malha “base”, que será utilizada para eventuais refinamentos definidos no Forte. A qualidade e o refinamento da malha “base” são obtidos por características construtivas dos elementos das superfícies, apresentadas na Figura 25: distância e ângulo máximos entre as faces (elementos) e comprimento de aresta máximo.

A fim de realizar uma análise de independência de malha, foram escolhidos quatro diferentes valores para as características supracitadas, convertendo assim a geometria para as quatro malhas ora denominadas: “Malha Grosseira (*Coarse Mesh*)”, “Malha Intermediária (*Intermediate Mesh*)”, “Malha Refinada (*Fine Mesh*)” e “Malha Muito Refinada (*Ultra Fine Mesh*)”.

A Tabela 8 apresenta o número de elementos de cada face, ou superfície, apresentadas na Figura 25, considerando as malhas descritas anteriormente.

Tabela 8 – Número de elementos e de vértices para cada superfície e as malhas “base”

Malha/ Superfície	Grosseira	Intermediária	Refinada	Muito Refinada
Crevice Bottom	E = 194 V = 144	E = 597 V = 368	E = 2212 V = 1244	E = 12716 V = 6699
Crevice Inner	E = 472 V = 285	E = 1414 V = 779	E = 5772 V = 3029	E = 36506 V = 18607
Head	E = 1627 V = 859	E = 6006 V = 3081	E = 24010 V = 12160	E = 147292 V = 74031
Liner	E = 598 V = 348	E = 1666 V = 908	E = 6406 V = 3352	E = 40970 V = 20854
Periodic A	E = 361 V = 252	E = 1125 V = 659	E = 4283 V = 2333	E = 26026 V = 13360
Periodic B	E = 361 V = 252	E = 1127 V = 660	E = 4283 V = 2333	E = 26032 V = 13363
Piston Bowl	E = 17805 V = 9034	E = 22519 V = 11420	E = 87970 V = 44304	E = 284706 V = 142892

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Ressalta-se que os elementos das superfícies são obtidos automaticamente a partir das características apresentadas na Tabela 9 e definidas para cada malha.

Tabela 9 – Características das malhas “base” para análise da independência de malha

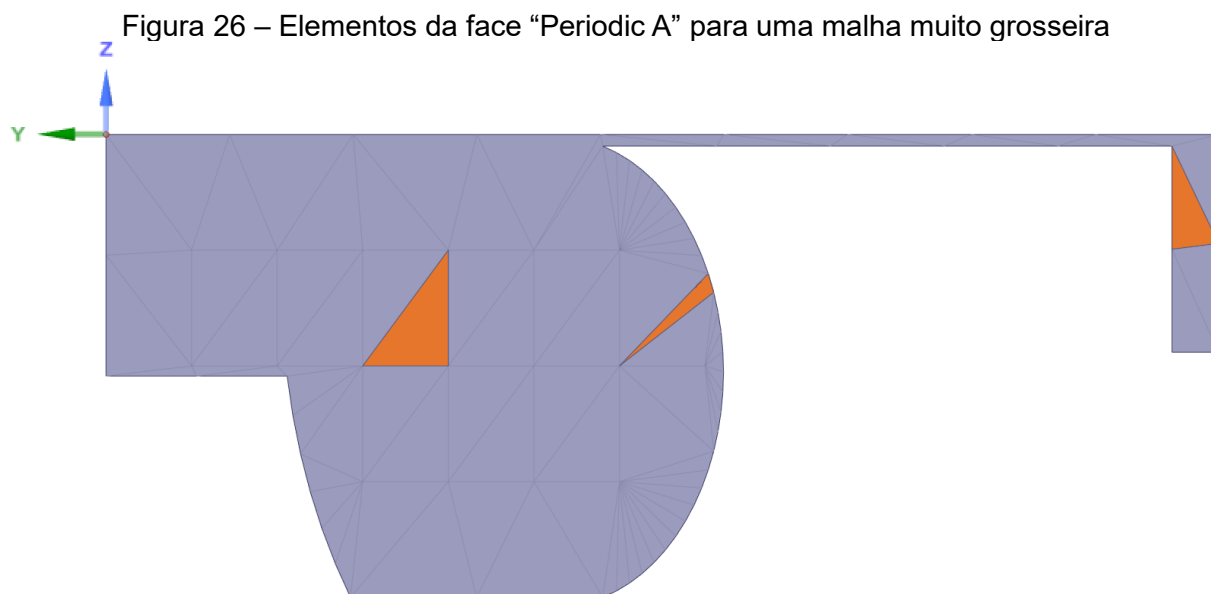
Malha	Característica	Valor
Grosseira	Distância Máxima [mm]	2
	Ângulo Máximo [°]	2
	Comprimento de Aresta Máximo [mm]	2
	Elementos (Faces) Totais	21418
Intermediária	Distância Máxima [mm]	1
	Ângulo Máximo [°]	2
	Comprimento de Aresta Máximo [mm]	1
	Elementos (Faces) Totais	34454
Refinada	Distância Máxima [mm]	0,1
	Ângulo Máximo [°]	1
	Comprimento de Aresta Máximo [mm]	0,5
	Elementos (Faces) Totais	134936
Muito Refinada	Distância Máxima [mm]	0,1
	Ângulo Máximo [°]	1
	Comprimento de Aresta Máximo [mm]	0,2
	Elementos (Faces) Totais	574248

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A Figura 26 apresenta os elementos para a face, ou superfície, denominada “Periodic A” considerando as características de construção de uma malha base muito grosseira, isto para melhor visualização dos elementos construtivos. Para esse caso, essa face possui 93 elementos triangulares e 78 vértices, sendo três elementos destacados na Figura 26, para melhor compreensão. Para as quatro malhas descritas anteriormente e empregadas no teste de independência de malha, o APÊNDICE A apresenta sua representação 3D no ponto morto superior.

Após a transformação de todas as faces do modelo 3D em elementos triangulares, descrito pelo processo anterior, o desenho é exportado em formato STL para ser utilizado no Forte. A exportação foi feita utilizando-se um formato ASCII e com a melhor resolução possível, a fim de resguardar a melhor qualidade dos elementos descritos na malha “base”.

No ambiente ANSYS/Forte, importa-se o arquivo contendo a câmara de combustão para o pistão no PMS com sua malha base na aba *Geometry*, vide Figura 21. Nessa etapa, a partir do arquivo no formato STL, é lida toda a geometria com suas respectivas faces identificadas.



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Como foi importada uma geometria para dentro do Forte, haverá uma geração automática da malha, através de um volume cartesiano em tempo real, combinada com um método de contorno imerso (ANSYS, 2022), seguindo as características do modelo importado, no caso aqui descrito como malha “base” e alguns critérios de tamanho de malha e controles de refinamento relacionados ao tamanho de malha e de controle de refinamento denominados *Global Mesh Size* e *Small Feature Deactivation Factor*, além de um ponto material dentro do domínio computacional, denominado *Material Point*, todos definidos na aba *Mesh* do Forte (vide Figura 21).

Além disso, a atualização da geração da malha automática é controlada por uma combinação de parâmetros de entrada e de restrições, sendo eles: Intervalo de tempo; Intervalo de ângulo do virabrequim; Distância de deslocamento de fluxo; Distância de deslocamento de *spray* e Distância de propagação de chama. Neste trabalho, considerou-se os valores pré-definidos no software. Para maiores detalhes sobre a influência desses parâmetros, recomenda-se a leitura do Guia de Usuário Ansys Forte (ANSYS, 2022).

A definição do ponto material, *Material Point*, deve ser feita de modo que esse ponto sempre esteja dentro do domínio computacional, no setor selecionado para a simulação, e em uma região de fluido ativa durante todo o ciclo de simulação; esse ponto deve estar acima do ponto mais alto do corpo do pistão, *piston bowl*, e logo abaixo da parte superior da câmara de combustão, *head* (ANSYS, 2022). Esse ponto é indicado em referência ao sistema de coordenadas adotado.

Posteriormente, especifica-se um tamanho global para a malha, *Global Mesh Size*. O manual do ANSYS/Forte sugere um valor entre 2 e 2,5 mm. Além disso, pode-se definir um fator de desativação de pequenos recursos aplicado globalmente à geometria. Seu valor varia entre 0 e 1, sendo que um valor mais alto filtrará mais recursos pequenos, o valor padrão é igual a 0,25 e sugere-se não o modificar (ANSYS, 2022).

Sugere-se que sejam feitos refinamentos estratégicos relacionados a regiões específicas da geometria 3D utilizada no problema. Esses refinamentos, que podem ser de superfície ou de volume, são obtidos a partir de uma fração de $1/(2^i)$ em relação ao tamanho da malha global e podem ser estáticos (estarão sempre ativos) ou dinâmicos (estarão ativos em um determinado intervalo de tempo) (ANSYS, 2022).

Neste trabalho foram escolhidos três tipos de refinamento de malha, baseado em projetos similares nos arquivos de tutoriais ANSYS/Forte para a combustão diesel em um setor da câmara de combustão (ANSYS, 2022):

- *Surfacedepth Refinement* – Refinamento de uma superfície em termos de *layers*. Foi empregado o refinamento na fração de $1/2$ da malha e dois *layers* nas regiões denominadas “*head*”, “*liner*” e “*piston bowl*”, sempre ativos.
- *Linedepth Refinement* – Refinamento próximo à linha de simetria do pistão. Foi empregado o refinamento na fração de $1/4$ da malha e em uma região definida entre o ponto morto superior e ponto morto inferior para o movimento do pistão, sempre ativo.
- *SAM Refinement* (Malha Adaptativa à Solução) – Refinamento de malha a partir dos campos de solução ou de seu gradiente para o fluxo e para a zona reativa. Foram empregados dois tipos de refinamentos para os gradientes dos campos de fração mássica de vaporização do combustível primário e de temperatura, com limites sigma estatísticos de 0,5 e $1/4$ de refinamento do tamanho da malha global. Para ambos, deixou-se esse refinamento sempre ativo e em todo o domínio computacional.

Vale ressaltar que podem ser adicionados controles de refinamento de malha relacionados à solução do campo de velocidade e, também, para alguma espécie química na análise de emissões, porém isso gerará maior esforço computacional.

É importante frisar que, por padrão, o Forte obtém as soluções no domínio do tempo (haja visto que o problema analisado é transiente) através de uma malha temporal adaptativa, ou seja, haverá variação no passo temporal ao longo da

simulação. Isso dependerá das características previamente mencionadas e, também, de fatores que serão discutidos na Seção 4.6.

4.4 Modelagem Matemática

Nessa seção serão descritas, de forma sucinta, as principais equações e modelos matemáticos teóricos que são básicos na modelagem dos campos de velocidade, temperatura, espécies químicas etc. Também serão apresentadas as formas como o Forte descreve essa modelagem de forma direta no software.

4.4.1 Equações de Conservação

Os fluidos de trabalho na análise da combustão em motores de combustão interna são descritos em duas etapas: mistura ar-combustível antes da combustão e produtos queimados após o processo de combustão. Esses fluidos são turbulentos e reativos, de forma a serem consideradas as equações de conservação de massa, espécie, quantidade de movimento linear e energia, além de equações para modelagem do *spray*, da turbulência, condições de compressibilidade etc.

- Conservação de Massa:

Relacionada com a conservação geral de todas as espécies presentes no escoamento e representa a relação entre a variação da massa específica ao longo do tempo e da posição. Pode ser descrita pela equação (ANSYS, 2022)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{\rho}^S \quad (42)$$

onde ρ é a massa específica do fluido de trabalho, t é a variável temporal, $\mathbf{u}$ é o vetor velocidade do escoamento e $\dot{\rho}^S$ é a taxa de geração de massa específica de evaporação no *spray*.

- Conservação de Espécies:

É similar à equação geral de conservação de massa, porém analisada para cada espécie do fluido, pois se trata de uma mistura de componentes individuais

modificada em relação aos processos de convecção, difusão molecular, transporte turbulento, interações com os *sprays* de combustível e da combustão em si.

De forma geral, a equação de conservação de massa da espécie i é matematicamente descrita na forma (ANSYS, 2022)

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u}) = \nabla \cdot [\rho D (\nabla y_i)] + \nabla \cdot \boldsymbol{\phi} + \dot{\rho}_i^C + \dot{\rho}_i^S \quad \text{onde } i = 1, 2, \dots, N \quad (43)$$

onde ρ_i é a massa específica da espécie i , N é o número total de espécies, $y_i = \rho_i / \rho$ é a fração mássica da espécie i , D é o coeficiente de difusão molecular (obtido da lei de Fick), $\boldsymbol{\phi}$ é o termo que considera os efeitos da média do termo convectivo e $\dot{\rho}_i^C$ é a taxa de geração de massa específica devido às reações químicas.

- Conservação de *Momentum*:

A equação de conservação de *momentum*, ou quantidade de movimento linear, considera o movimento convectivo do fluido, as forças de superfície (força de pressão e tensão viscosa) e de campo (força de gravitação), bem como o transporte turbulento e as relações de *sprays* líquidos. Sua expressão matemática é (ANSYS, 2022)

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - \nabla \cdot \boldsymbol{\Gamma} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}^S \quad (44)$$

onde p é a pressão, $\mathbf{F}^S$ é o vetor taxa de ganho de momentum devido ao *spray* por unidade de volume, $\mathbf{g}$ é o vetor aceleração da gravidade, $\boldsymbol{\Gamma}$ é o tensor de tensões que contabiliza os efeitos da média do conjunto ou filtragem do termo de convecção não linear e $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões viscosas definido por

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \nu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (45)$$

onde ν é a viscosidade cinemática laminar, $\mathbf{I}$ é o tensor identidade.

O termo de tensões que contabiliza as médias convectivas, $\boldsymbol{\Gamma}$, na Eq. (44) é denominado tensor de tensões de Reynolds ao se utilizar a modelagem de turbulência pela abordagem RANS (*Reynolds Average Navier-Stokes*).

- Conservação de Energia:

Essa equação baseia-se na Primeira lei da Termodinâmica, que relaciona as mudanças da energia interna com o trabalho e a transferência de calor. Todavia, em análises de motores de combustão interna, deve-se também levar em consideração os efeitos convectivos, de turbulência, *sprays*, reações químicas e difusão de entalpia de um fluxo multicomponente (ANSYS, 2022). Assim, a equação de transporte interno de energia é descrita como

$$\frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} U) = -p \nabla \cdot \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{J} - \nabla \cdot \mathbf{H} + \rho \varepsilon + \dot{Q}^C + \dot{Q}^S - \dot{Q}_{rad} \quad (46)$$

onde U refere-se à energia interna específica, ε é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta, $\mathbf{H}$ é o termo que contabiliza os efeitos da média do conjunto ou filtragem do termo de convecção, $\dot{Q}^C$ e $\dot{Q}^S$ são os termos-fonte devido à liberação de calor pelas reações químicas e por iterações de *sprays*, respectivamente, $\dot{Q}_{rad}$ refere-se às perdas de calor por radiação e $\mathbf{J}$ é o vetor fluxo de calor que contabiliza a condução de calor e a difusão entálpica, definido como (ANSYS, 2022)

$$\mathbf{J} = -\lambda \nabla T - \rho D \sum_i (h_i \nabla y_i) \quad (47)$$

onde λ é a condutividade térmica, T é a temperatura do fluido de trabalho e h_i é a entalpia específica de cada espécie i .

- Equações de Estado da Mistura na Fase Gasosa

Definem as relações matemáticas para as propriedades termodinâmicas (temperatura, pressão e massa específica) para a mistura na fase gasosa e, também, para a energia interna. No ANSYS Forte, estão presentes a equação de estado de gás ideal e o modelo de gás real de Peng-Robinson. Por simplificações, neste trabalho considerou-se apenas as equações de estado para gás ideal. A relação entre as propriedades termodinâmicas é dada por (ANSYS, 2022)

$$p = R_u T \sum_i \left(\frac{\rho_i}{W_i} \right) \quad (48)$$

sendo R_u a constante universal dos gases ideais e W_i o peso molecular da espécie i .

enquanto que a variação da energia interna da mistura gasosa, U , é tomada como sendo apenas função da temperatura, $U = U(T)$, e obtida pela média ponderada da energia interna de cada espécie, ou seja, (ANSYS, 2022)

$$U(T) = \sum_i [y_i U_i(T)] \quad (49)$$

onde U_i é a energia interna específica da espécie i .

4.4.2 Modelagem da Turbulência

Na literatura há diversos modelos para descrever o escoamento turbulento de um fluido, utilizando: médias de Reynolds (modelo RANS – *Reynolds Averaged Navier-Stokes*), grandes escalas (modelo LES – *Large Eddy Scale*) ou de forma direta (modelo DNS – *Direct Numerical Simulation*).

No ANSYS Forte há quatro opções de modelagem da turbulência: RANS Standard $k-\varepsilon$, RANS RNG $k-\varepsilon$, LES Smagorinsky e LES Dynamic Structure. Segundo o Manual de Melhores Práticas do Forte (ANSYS, 2022), em motores de combustão interna, a abordagem RANS é a mais eficiente pois simula a média do conjunto de fluxo turbulento de processos de transporte, sendo a opção RANS RNG $k-\varepsilon$ a mais indicada para a maioria dos problemas de escoamento e de combustão em MCI's (Han e Reitz, 1995), não havendo necessidade de ajuste dos seus parâmetros padrões do *software*.

Portanto, considerando essas recomendações, será descrito neste trabalho apenas a modelagem da abordagem RANS, que utiliza uma média para simular o campo de escoamento. O modelo é descrito em termos de $\mathbf{u}$, $\mathbf{\Gamma}$, ϕ e H .

A equação de *momentum* considera que as partes flutuantes do tensor de tensões de Reynolds são proporcionais à taxa média de deformação do fluido, de forma que o tensor de tensões de Reynolds, $\mathbf{\Gamma}$, pode ser escrito como (ANSYS, 2022)

$$\mathbf{\Gamma} = -\rho \nu_T \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \quad (50)$$

onde ν_T é a viscosidade cinemática turbulenta e k é a energia cinética turbulenta definida por

$$k = -\frac{1}{2\rho} \text{traço}(\mathbf{\Gamma}) \quad (51)$$

onde $\text{traço}(\mathbf{\Gamma})$ refere-se ao traço do tensor de tensões de Reynolds.

A viscosidade turbulenta, da Eq. (50), é descrita através da relação

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (52)$$

onde C_μ é uma constante de turbulência desse modelo e ε é a taxa de dissipação turbulenta que é definida por

$$\varepsilon = C_\mu \frac{k^{3/2}}{L} \quad (53)$$

onde L é um comprimento característico de turbulência

Nota-se, a partir das Eqs. (50), (51) e (52), que para o cálculo de ν_T deve-se obter os valores de k e ε . O Forte considera a dilatação da velocidade ao se obter a taxa de dissipação turbulenta e os termos de fonte induzida pelo *spray* nos cálculos tanto da taxa de dissipação turbulenta quanto da energia cinética turbulenta.

Considerando os modelos com abordagem RANS presentes no Forte (standard e RNG k - ε), a variação da taxa de dissipação turbulenta ao longo do tempo é descrita similarmente para ambas as abordagens, sendo dada por

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{u} + (\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{\Gamma}) : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\frac{(\mu + \mu_T)}{Pr_k} \nabla k \right] - \rho \varepsilon + \overline{W^S} \quad (54)$$

onde Pr_k é uma constante dos modelos e o termo fonte $\overline{W^S}$ é calculado a partir da função de distribuição de probabilidade de gotículas do *spray*.

Por sua vez, a variação da energia cinética turbulenta ao longo do tempo é descrita pelas Eqs. (55) e (56) para os modelos RANS Standard e RNG, nessa ordem.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) = & -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3}\right) \rho \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\frac{(\nu + \nu_T)}{Pr_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right] \\ & + \frac{\varepsilon}{k} \left[C_{\varepsilon 1} (\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{\Gamma}) : \nabla \mathbf{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_s \overline{W^S} \right] \end{aligned} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) = & - \left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3} \right) \rho \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[\frac{(\nu + \nu_T)}{Pr_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right] \\ & + \frac{\varepsilon}{k} \left[C_{\varepsilon 1} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\Gamma}) : \nabla \mathbf{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_S \overline{W^S} \right] - \rho R \end{aligned} \quad (56)$$

Para ambas as Eqs. (55) e (56), as variáveis $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $C_{\varepsilon 3}$ e C_S são constantes de cada modelo, sendo que é sugerido utilizar $C_S = 1,5$ (ANSYS, 2022). Além disso, na Eq. (56), o termo R é descrito pela equação

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \varepsilon^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{1}{k} \quad (57)$$

onde

$$\eta = (2\mathbf{S} : \mathbf{S})^{1/2} \frac{\varepsilon}{k} \quad (58)$$

sendo $\mathbf{S}$ o tensor taxa de deformação média, que é definido como

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (59)$$

Na Eq. (56), a terceira constante geral da energia cinética turbulenta é calculada pela seguinte relação

$$C_{\varepsilon 3} = \frac{-1 + 2C_{\varepsilon 2} - 3m(n-1) + (-1)^\delta \sqrt{6} C_\mu C_\eta \eta}{3} \quad (60)$$

onde $m = 0,5$ e $n = 0,4$ para gases ideais e C_η e δ são definidos por

$$C_\eta = \frac{\eta \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right)}{1 + \beta \eta^3} \quad (61)$$

$$C_\eta = \frac{\eta \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0}\right)}{1 + \beta \eta^3} \quad (62)$$

Os valores das diversas constantes presentes nos modelos anteriores foram analisados ao longo de anos através de estudos experimentais e de simulações numéricas. Para motores de combustão interna, os valores padrões sugeridos pelo

Forte baseou-se nos estudos de Han e Reitz (1995) que observaram melhores resultados entre os modelos $k-\varepsilon$ Standard e RNS $k-\varepsilon$. A Tabela 10 apresenta os valores padrões para ambos os modelos. Como recomendado, ao longo deste trabalho esses valores não foram modificados.

Tabela 10 – Constantes padrões dos modelos RANS de turbulência

Constante/ Modelo	C_μ	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	$\frac{1}{Pr_k}$	$\frac{1}{Pr_\varepsilon}$	η_0	β
$k-\varepsilon$ Standard	0,09	1,44	1,92	-1,0	1,0	0,769	---	---
RNS $k-\varepsilon$	0,0845	1,42	1,68	Eq. (60)	1,39	1,39	4,38	0,012

Fonte: ANSYS (2022).

A modelagem da turbulência e das propriedades do fluido (número de Prandtl, inverso dos números de Prandtl e de Schmidt turbulentos, viscosidade dinâmica e condutividade térmica do ar de referência), são inseridas na aba “Models – Transport – Turbulence” do Forte.

Tanto a viscosidade dinâmica, μ , quanto a condutividade térmica, λ_t , de referência para o ar são tomadas em função da temperatura, pelo modelo de Sutherland:

$$\mu = \frac{C_{\mu 1} T^{3/2}}{T + C_{\mu 2}} \quad (63)$$

$$\lambda_t = \frac{C_{\lambda 1} T^{3/2}}{T + C_{\lambda 2}} \quad (64)$$

Nas Eqs. (63) e (64), $C_{\mu 1}$, $C_{\mu 2}$, $C_{\lambda 1}$ e $C_{\lambda 2}$ são constantes dos respectivos modelos, sendo mantidos seus valores padrões: $C_{\mu 1} = 1,457 \cdot 10^{-5}$, $C_{\mu 2} = 110$, $C_{\lambda 1} = 252$ e $C_{\lambda 2} = 200$, para se obter a viscosidade, em g/(cm·s), e a condutividade térmica, em erg/(cm·K·s), unidades padrões do Forte.

4.4.3 Modelagem da Cinética Química e da Velocidade de Chama

Outro tópico de extrema relevância no processo de modelagem da combustão em motores de combustão interna está relacionado à modelagem das reações

químicas que ocorrem no interior da câmara de combustão. Essas reações podem ser modeladas através de mecanismos que envolvem a cinética química das reações das espécies químicas associadas à mudança de concentração e sua geração/destruição.

De forma geral, uma reação química (reversível e/ou irreversível) envolvendo N espécies é representada em sua forma geral e compacta como (TURNS, 2013; ANSYS, 2022)

$$\sum_{j=1}^N (v'_{ji} X_j) \Leftrightarrow \sum_{j=1}^N (v''_{ji} X_j) \quad (65)$$

onde v' e v'' indicam os coeficientes estequiométricos dos reagentes e dos produtos, respectivamente, X indica a espécie química e os índices j e i indicam, respectivamente, à espécie e à reação química, sendo $i = 1, 2, \dots, L$.

A taxa de produção líquida de cada espécie química em um mecanismo de múltiplas reações, como o da combustão do diesel, é expressa em sua forma compacta como (TURNS, 2013; ANSYS, 2022)

$$\dot{\omega}_j = \sum_{i=1}^L [q_i (v''_{ji} - v'_{ji})] \quad (66)$$

onde q_i é a taxa de progresso para a i -ésima reação elementar, descrita pela diferença das taxas direta e reversa, ou seja,

$$q_i = k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}} \quad (67)$$

onde k_{fi} e k_{ri} representam as constantes cinéticas direta e reversa da i -ésima reação.

A partir da teoria das colisões moleculares, que envolve conceitos de energia de ativação de reação e probabilidade de a colisão resultar em uma reação química, e que não será discutida nesse texto, pode-se determinar uma equação que modela a constante cinética da reação química, considerando esses aspectos. No entanto, essa teoria é complexa e pode ser simplificada através da utilização de um modelo baseado em resultados experimentais.

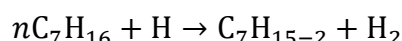
Esse modelo empírico é conhecido como Lei de Arrhenius e modela a constante cinética da i -ésima reação em função da temperatura em termos de três parâmetros empíricos, A , B e E , (TURNS, 2013):

$$k_i(T) = A_i \cdot T^{B_i} \cdot \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) \quad (68)$$

onde A_i é o fator pré-exponencial que indica a frequência de colisões favoráveis para ocorrer a i -ésima reação química, B_i é o fator de temperatura para a i -ésima reação, em muitos casos nulo, e E_i é a energia de ativação da i -ésima reação.

No formato do Chemkin-Pro, que é utilizado dentro da rotina do Forte para solucionar as reações químicas da combustão, para cada reação química deve-se fornecer os valores de A , B e E da Eq. (68), no pacote denominado *Gas-Phase Kinectis*.

Considerando as Eqs. (67) e (68) e o formato implementado no ANSYS Chemkin-Pro, os gráficos de Arrhenius são expressos na forma $\log(k) \times 1/T$, podendo-se extrair a energia de ativação da respectiva reação química, haja visto que os coeficientes angulares dessas curvas representam a quantidade $-E/R$. Considerando a reação química entre uma molécula de n-heptano (nC_7H_{16}) e uma de hidrogênio (H)



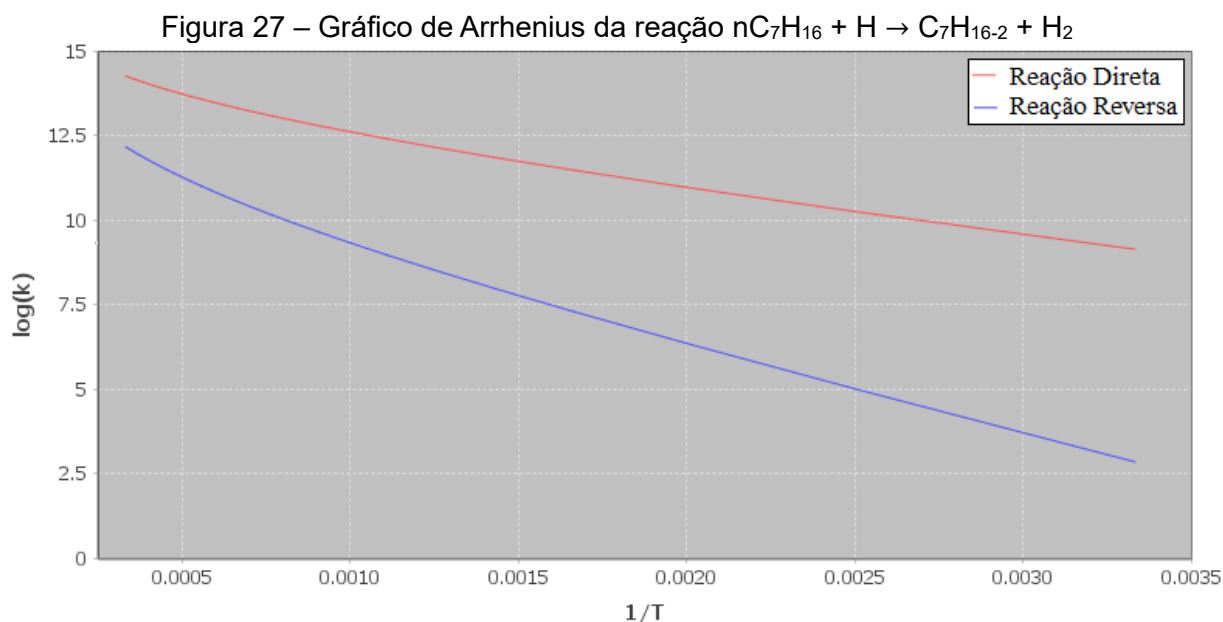
tem-se como produtos a 2-heptila (C_7H_{15-2}) e o hidrogênio em sua forma gasosa (H_2).

Os coeficientes empíricos descritos na Eq. (68) para essa reação química são $A = 4,38 \cdot 10^7 \text{ mol} \cdot \text{cm} \cdot \text{s} \cdot \text{K}$; $B = 2,0$; $E = 4760 \text{ cal/mol}$. A Figura 27 apresenta o gráfico de Arrhenius para essa reação química direta e reversa.

No ambiente ANSYS/Forte, na aba “Models – Chemistry/Materials”, faz-se um upload de um arquivo no formato CKS, proveniente do Chemkin-Pro, contendo todas as reações químicas empregadas no processo de combustão em análise, com as respectivas informações das constantes empíricas da lei de Arrhenius, além de informações termodinâmicas para cada espécie química. Cada reação possui um gráfico similar ao apresentado na Figura 27.

Na literatura há diversos modelos para descrever a cinética química de reações para o diesel, modelado pela espécie n-heptano (nC_7H_{16}), alguns mais simples e outros mais complexos. Quanto maior a complexidade do mecanismo, maior será a

quantidade de espécies e reações químicas e, também, maior será o custo computacional para obtenção das soluções do problema.



O trabalho de Curran *et al.* (1998) apresentou um dos primeiros modelos detalhados para analisar a oxidação do n-heptano e vem servindo como base para o desenvolvimento de modelos cinéticos mais simplificados ao longo dos anos. Esse modelo detalhado apresenta 570 espécies e 2520 reações químicas e possui comparações com experimentos para a oxidação de n-heptano em reatores de fluxo, tubos de choque e máquinas de compressão rápida, considerando uma larga faixa de temperatura, pressão e razão de equivalência (PATEL, KONG, REITZ, 2014).

Outro modelo detalhado amplamente utilizado é o modelo denominado “*LLNL Mechanism*”, LLNL por ter sido desenvolvido no Laboratório Nacional Lawrence Livermore (USA) a partir do modelo anterior. Esse modelo é mais simples que o anterior, possuindo 179 espécies e 1642 reações químicas, mas também apresenta resultados satisfatórios para a oxidação do $n\text{C}_7\text{H}_{16}$ tanto em baixas quanto em altas temperaturas e em uma ampla faixa de pressão importante para motores de combustão interna (KATTA, AGGARWAL e ROQUEMORE, 2012; PATEL, KONG e REITZ, 2014; LLNL, 2022).

Muitos outros modelos, com menores quantidades de espécies e reações químicas foram desenvolvidos ao longo dos anos e podem ser encontrados na literatura. Também há outros modelos que focam na descrição detalhada dos produtos

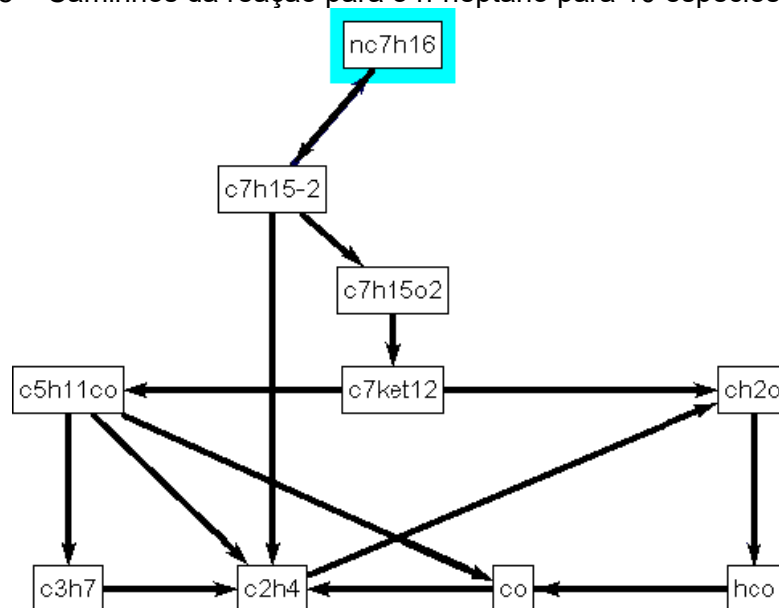
da combustão, como NO_x, fuligem etc. No entanto, o detalhamento de tais modelos vai além do escopo deste trabalho.

O manual do usuário do Forte (ANSYS, 2022) apresenta alguns modelos cinéticos já implementados no formato para análise de combustão, considerando 35, 189, 191 e 354 espécies químicas já validados experimentalmente.

O modelo mais simplificado possui um componente, 35 espécies e 74 reações e é denominado na base de dados do ANSYS como Diesel_1comp_35sp, sendo baseado no trabalho de Patel, King e Reitz (2014). Para efeitos de simplificação da nomenclatura, aqui ele será denotado como modelo D35sp. Este modelo foi validado experimentalmente considerando o tempo de ignição, experimento de tubo de choque e velocidade de chama e foi utilizado em tutoriais de análise da combustão do diesel em um setor, similar ao realizado nesse trabalho, apresentando resultados satisfatórios. Além disso, é o único modelo na base de dados do Chemkin-Pro e do Forte que permite a visualização de todas as reações químicas. As reações químicas desse modelo, bem como os valores dos parâmetros da lei de Arrhenius, no formato do Chemkin-Pro, são apresentados no ANEXO A.

A Figura 28 apresenta os caminhos da reação do n-heptano (nC₇H₁₆), obtido no Chemkin-Pro, para a formação/destruição das dez principais espécies químicas, para o modelo D35sp considerando nesse trabalho, em $t = 0,01 \text{ s} \rightarrow \text{CAD} = -14^\circ$, o que corresponde a um ponto da curva de pressão no cilindro após o início da injeção do combustível primário (diesel / HVO).

Figura 28 – Caminhos da reação para o n-heptano para 10 espécies principais



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Visando um dos objetivos deste trabalho, que é obter um modelo cinético adaptado para simular o processo de combustão do HVO puro e de uma mistura *dual-fuel* HVO-Biogás, não encontrados na literatura, buscou-se empregar um modelo de diesel simplificado cujas reações pudessem ser identificadas em um modelo no formato do Chemkin-Pro disponível e não criptografado. Dessa forma, escolheu-se o modelo D35sp para validação com os resultados experimentais da combustão de diesel puro no motor Buffalo BFDE 10.0 (vide Figura 22) desenvolvidos durante o Projeto ROTA 2030.

No ambiente do Forte, as informações relativas à cinética química do fluido são carregadas na aba “Models – Chemistry/Materials”, importando-se o arquivo no formato CKS. Esse arquivo, além conter as informações de cinética química, também possui as propriedades termodinâmicas de todos os elementos e espécies químicas presentes na simulação computacional.

Além da cinética química, na parte referente à modelagem química, devem ser considerados modelos para descrever a velocidade de chama laminar e turbulenta.

No caso da velocidade de chama laminar, o Forte utiliza o modelo de lei de potência descrito pela equação de Metghalchi, considerando como velocidade de chama laminar de referência o modelo de Gülder, pelo fato de o mesmo não contabilizar velocidades de chama negativas para os casos de misturas muito pobres ou muito ricas. Por sua vez, a velocidade de chama turbulenta pode ser modelada através do modelo de Clavin-Williams (quando se modela a turbulência pelo modelo LES) ou por um modelo padrão do Forte, que foi empregado nesse trabalho.

Há uma série de constantes para descrever os modelos de velocidade de chama laminar e turbulenta, sendo adotados nesse trabalho os valores padrões para essas constantes, haja visto que sua análise vai além do escopo deste trabalho. Para informações mais detalhadas das equações e/ou constantes na modelagem de velocidade de chama, pode-se consultar o trabalho de Metghalchi e Keck (1982) e o Guia Teórico do Forte (ANSYS, 2022).

4.4.3.1 Adaptação de Modelos Cinéticos para HVO e HVO-Biogás

A fim de se obter um modelo que descreve a cinética química para a combustão do HVO puro e da mistura HVO-Biogás, considerou-se um processo de otimização para o modelo cinético do diesel já presente na base de dados do Chemkin-Pro e do

Forte, o modelo D35sp. Essa consideração foi feita devido às estruturas e características similares entre o diesel fóssil e o HVO (diesel verde).

O objetivo dessa etapa foi variar as constantes empíricas da lei de Arrhenius, Eq. (68), considerando um intervalo ajustado em limites acima e abaixo dos valores originais do modelo D35sp (vide ANEXO A), através de um algoritmo de otimização que busca aleatoriamente esses valores dentro desse intervalo. Trabalhos como os de Yu e Zhao (2020), Tay *et al.* (2020) e Wu *et al.* (2021) realizam um procedimento similar.

O algoritmo de otimização considerado nesse trabalho foi o de Lichtenberg. Ele foi desenvolvido pelo Grupo de Mecânica Computacional e Otimização (GEMEC) da UNIFEI e considera uma otimização meta-heurística híbrida composta por métodos de busca baseados em população e trajetória e inspirado nos fenômenos físicos dos raios intra-nuvem e nos padrões de figuras de Lichtenberg (PEREIRA *et al.*, 2021).

O algoritmo realiza diversas rodadas dentro de um limite estipulado de iterações. A cada rodada, o algoritmo busca aleatoriamente valores para as variáveis da lei de Arrhenius, definidas *a priori*. Esses valores são denominados estimativas e para cada uma delas analisa-se todo o processo de combustão através de um modelo 0-D desenvolvido no Chemkin-Pro, de modo que a curva de pressão no cilindro $\times$ ângulo do virabrequim ($p \times \phi$) obtida por esse modelo com essas novas constantes é comparada à curva $p \times \phi$ obtida experimentalmente, tratando-se assim de uma otimização do tipo mono objetiva.

O melhor ajuste dessa curva, após a série de rodadas e iterações escolhidas, é obtido analisando-se o valor do coeficiente de determinação entre as curvas, R^2 , e os erros relativos para os valores da pressão máxima no cilindro e da estimativa do início da combustão. O erro geral a cada estimativa foi calculado considerando alguns pesos de importância para as três variáveis descritas anteriormente. A seguir é descrito como esses cálculos são realizados.

Os resultados para a pressão no cilindro são obtidos a cada $0,5^\circ$ pelo modelo ajustado, como no experimento, sendo o coeficiente de determinação dado por

$$R^2 = 1 - \frac{SQ_{res}}{SQ_{tot}} \quad (69)$$

onde as variáveis SQ_{res} e SQ_{tot} referem-se às somas quadráticas dos resíduos e a total, definidas por

$$SQ_{res} = \sum_{i=1}^n [(p_i^{\text{exper}} - p_i^{\text{model}})^2] \quad (70)$$

e

$$SQ_{tot} = \sum_{i=1}^n [(p_i^{\text{exper}} - p_{\text{médio}}^{\text{exper}})^2] \quad (71)$$

onde p^{exper} e p^{model} são os valores das pressões obtidos no experimento e pelo modelo ajustado, respectivamente, e $p_{\text{médio}}^{\text{exper}}$ é o valor médio das pressões obtidas no experimento.

Os erros relativos para o pico na pressão no cilindro, $p_{\text{máx}}$, e para a estimativa do início da combustão, SOC , foram calculados como

$$ER_{P_{\text{máx}}} = \frac{p_{\text{máx}}^{\text{model}} - p_{\text{máx}}^{\text{exper}}}{p_{\text{máx}}^{\text{exper}}} \quad (72)$$

e

$$ER_{SOC} = \frac{SOC^{\text{model}} - SOC^{\text{exp}}}{SOC^{\text{exp}}} \quad (73)$$

onde ER são os erros relativos, $p_{\text{máx}}^{\text{model}}$ e $p_{\text{máx}}^{\text{exper}}$ são os valores máximos, ou de pico, das pressões obtidos pelo modelo ajustado e experimentalmente, respectivamente e SOC^{model} e SOC^{exp} são os valores das estimativas do início da combustão, do inglês *Start Of Combustion*, obtidos pelo modelo ajustado e pelo experimento, respectivamente.

O erro percentual geral balanceado para cada rodada obtida por uma estimativa das taxas de reações no algoritmo de otimização é calculado por

$$EP_{total} = 100 \cdot [W_{P_{\text{máx}}} \cdot |ER_{P_{\text{máx}}}| + W_{SOC} \cdot |ER_{SOC}| + W_{R^2} \cdot (1 - R^2)] \quad (74)$$

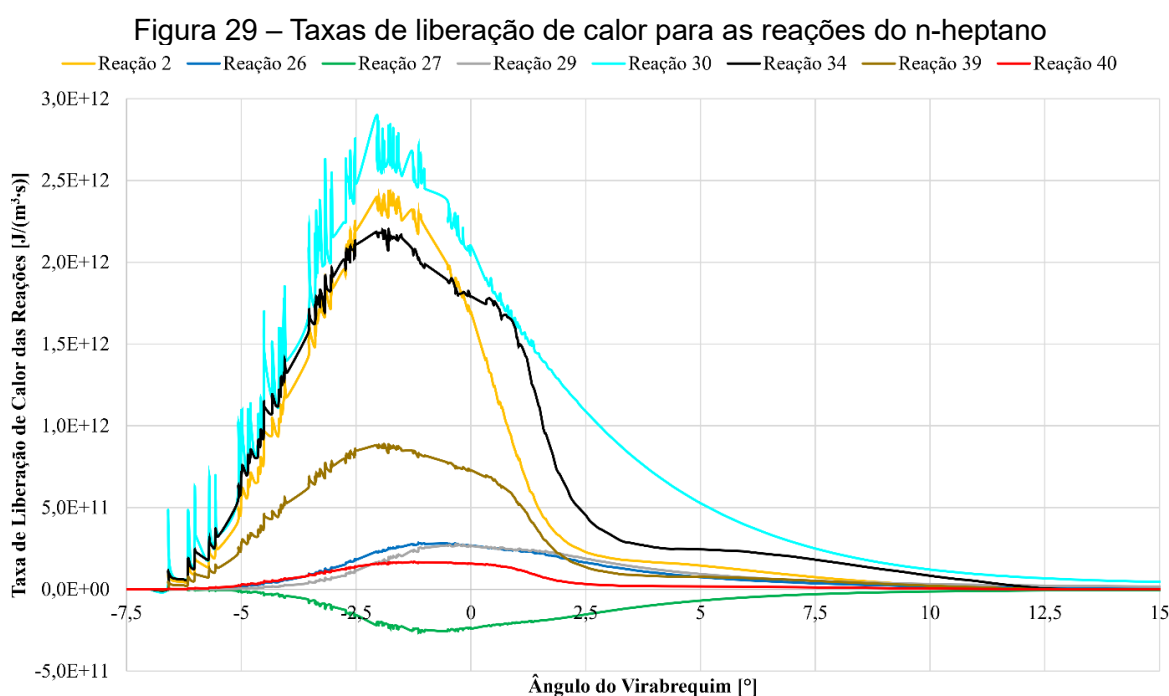
sendo W os pesos referentes aos respectivos erros relativos ou ao coeficiente R^2 . Foram considerados os seguintes pesos: $W_{P_{\text{máx}}} = 0,15$, $W_{SOC} = 0,10$ e $W_{R^2} = 0,75$.

Ressalta-se que as análises de ajuste e de erros, descritas anteriormente, são realizadas apenas quando há uma solução física do problema (predição dos processos de compressão, injeção, combustão e expansão). Isso é dito pois, em alguns casos, a combinação das variáveis escolhida aleatoriamente dentro do intervalo definido pelo algoritmo de otimização pode nem sempre resultar em uma solução física, e isso não pode ser previsto *a priori*.

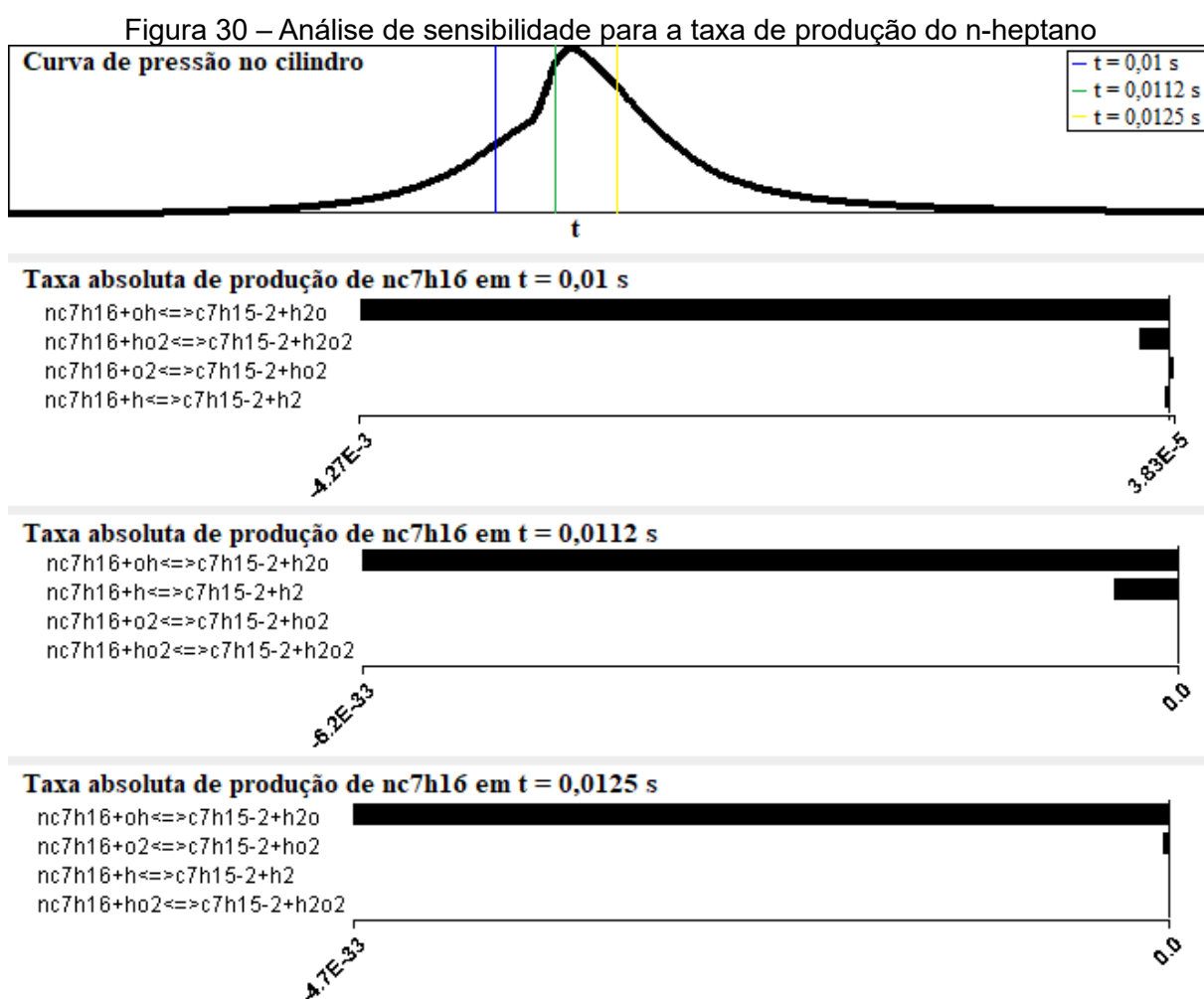
Mesmo tendo-se escolhido um modelo cinético simplificado, há um grande número de reações químicas a serem analisadas pelo processo de otimização, gerando assim um alto custo computacional. Logo, seguindo um processo similar ao realizado por Yu e Zhao (2020), Tay *et al.* (2020) e Wu *et al.* (2021), escolheu-se como variável de otimização apenas o fator pré-exponencial na lei de Arrhenius, A .

Ainda assim, a fim de tornar o processo menos custoso computacionalmente, verificou-se de antemão quais as reações químicas possuíam maior liberação de calor, e realizou-se uma rápida análise de sensibilidade das principais reações responsáveis pela formação e/ou destruição do combustível primário, nC_7H_{16} . A partir dessas análises, foram escolhidas as principais reações químicas do modelo D35sp para se modificar os valores de A na lei de Arrhenius pelo processo de otimização.

A Figura 29 apresenta a variação da taxa de liberação de calor para as reações químicas com as maiores taxas de liberação de calor, o que compreende oito reações, conforme enumeradas no ANEXO A descritas a seguir.



A análise de sensibilidade para a taxa de produção (formação e/ou consumo) do nC_7H_{16} foi realizada no Chemkin-Pro, o mesmo software empregado para a construção do caminho de reação apresentado na Figura 28. A Figura 30 apresenta essa análise em três pontos da curva de pressão no cilindro após o início injeção de combustível (CAD = -22°): Ponto 1: antes do início da combustão ($t = 0,01 \text{ s} \rightarrow \text{CAD} = -14^\circ$); Ponto 2: após o início da combustão e antes do pico de pressão ($t = 0,0112 \text{ s} \rightarrow \text{CAD} = -1,04^\circ$); Ponto 3: após o pico da pressão e após o término da injeção de combustível ($t = 0,0125 \text{ s} \rightarrow \text{CAD} = 13^\circ$).



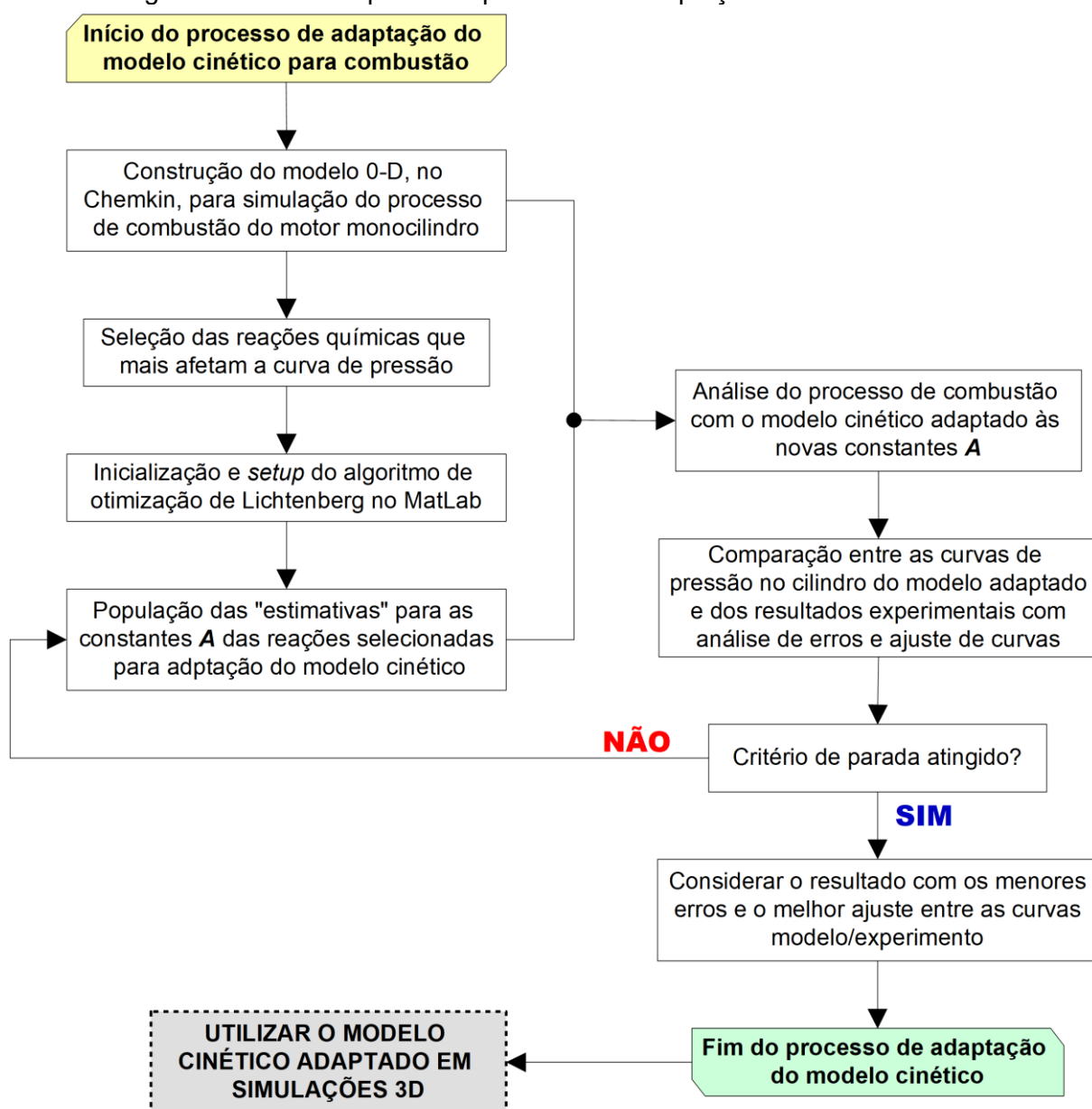
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Pela Figura 30, pode-se observar que a reação química com maior importância no processo de combustão é a reação $\text{nC}_7\text{H}_{16} + \text{OH} \rightarrow \text{C}_7\text{H}_{15-2} + \text{H}_2\text{O}$, que é a segunda reação dentro da lista de todas presentes no modelo descrito no ANEXO A, além de possuir as maiores taxas absolutas de produção. Além disso, da análise para a taxa de liberação de calor, essa reação corresponde à segunda maior, como apresentado

na Figura 29. Nota-se ainda que as taxas de produção do n-heptano são negativas, indicando a destruição, ou consumo, dessa espécie química.

Então, considerando a análise da taxa de liberação de calor das reações e a análise da taxa absoluta de produção da espécie química relevante para o processo de combustão do HVO (n-heptano), escolheu-se as reações químicas cujos fatores pré-exponenciais na equação de Arrhenius, Eq. (68), serão modificados pelo algoritmo de otimização. Um passo a passo desse processo para a obtenção do modelo cinético adaptado é apresentado na Figura 31.

Figura 31 – Passo a passo do processo de adaptação do modelo cinético



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Para o caso da análise da combustão *dual-fuel*, a injeção do combustível secundário é do tipo *port injection*, como mostrado na Figura 4, ou seja, nesse tipo de sistema a entrada desse combustível é feita juntamente com o ar na fase de admissão. No caso desse trabalho, foi considerada a injeção do biogás via *port-injection*.

Como a análise feita nesse trabalho envolve a parte relativa à combustão, ou seja, com as válvulas de admissão e de exaustão fechadas, a mistura de ar com o biogás é tratada como sendo homogênea e já presente na câmara de combustão no início das simulações computacionais.

Para adaptação do modelo cinético do caso *dual-fuel*, deve-se calcular a fração molar de biogás, junto com o ar, nos reagentes, o que é feito a partir das vazões mássicas de ar e biogás e de suas respectivas massas molares. As vazões molares de ar e biogás são calculadas, respectivamente, por

$$\dot{M}M_{ar} = \frac{\dot{m}_{ar}}{MM_{ar}} \quad (75)$$

e

$$\dot{M}M_{biogás} = \frac{\dot{m}_{biogás}}{MM_{biogás}} \quad (76)$$

onde $\dot{M}M$, $\dot{m}$ e MM correspondem respectivamente à vazão molar, à vazão mássica e a fração molar de cada componente.

Ressalta-se que a fração molar do biogás dependerá de sua composição, ou seja, da porcentagem de CH_4 e CO_2 . As frações molares de ar e biogás nos reagentes são obtidas a partir da média ponderada de cada componente, ou seja,

$$x_{ar} = \frac{\dot{M}M_{ar}}{\dot{M}M_{ar} + \dot{M}M_{biogás}} \quad (77)$$

$$x_{biogás} = \frac{\dot{M}M_{biogás}}{\dot{M}M_{ar} + \dot{M}M_{biogás}} \quad (78)$$

onde x_{ar} e $x_{biogás}$ são as frações molares de ar e de biogás.

O valor de x_{ar} obtido na Eq. (77) é menor que a unidade para o caso *dual-fuel*, haja visto que $MM_{biogás} > 0$, mas sua soma com a fração molar de biogás é igual a unidade, ou seja, $x_{ar} + x_{biogás} = 1$, que é a forma que o Chemkin-Pro e o Forte utilizam na composição inicial.

De forma geral, as equações que calculam as frações molares de O₂, N₂, CH₄ e CO₂ na mistura gasosa no momento que a válvula de admissão está fechada (início das simulações computacionais), considerando 21% de O₂ e 79% de N₂ no ar e 65% de CH₄ e 35% de CO₂ no biogás, em bases volumétricas, são

$$\begin{aligned}x_{O_2} &= 0,21 \cdot x_{ar} \\x_{N_2} &= 0,79 \cdot x_{ar} \\x_{CH_4} &= 0,65 \cdot x_{biogás} \\x_{CO_2} &= 0,35 \cdot x_{biogás}\end{aligned}\tag{79}$$

Tem-se que $x_{O_2} + x_{N_2} + x_{CH_4} + x_{CO_2} = 1$, como mencionado anteriormente.

A fim de tornar mais claro esse procedimento de cálculo, é apresentado no APÊNDICE B um exemplo numérico.

Note que, ao se modificar a vazão mássica do combustível secundário, as frações molares nos reagentes, irão se modificar, exceto para o combustível primário.

Além disso, dentro do código para adaptação do modelo cinético para o caso *dual-fuel*, pode-se também generalizar o cálculo das frações molares em relação à composição do biogás, podendo assim serem analisados os efeitos de sua composição, mudando-se então as parcelas 0,65 e 0,35 nas Eqs. (79). Nesse trabalho não foram avaliadas modificações na composição do biogás empregado nos testes experimentais.

Visando à obtenção desse modelo cinético adaptado, além de se considerar as reações químicas descritas anteriormente para o caso *single-fuel*, para o caso *dual-fuel* com biogás também deve-se considerar as reações que formam ou consomem as espécies químicas que o compõe, no caso o metano e o dióxido de carbono.

Para tal, foi realizada uma análise das taxas de liberação de calor para as reações que contém metano nos seus reagentes, reações 44, 47, 48, 49, 50 e 51 no modelo D35sp, ANEXO A. As taxas de liberação de calor dessas seis reações são apresentadas na Figura 32, onde nota-se claramente que a reação que possui maior

influência com relação ao consumo de CH_4 é a de número 48, sendo a segunda reação com maior pico, a reação 49, cerca de mais de dez vezes menor, em módulo.



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

O segundo componente considerado no biogás é o dióxido de carbono, mas, por se tratar de um gás inerte, ou seja, que não reage com o combustível e não participa do processo de combustão, não foi realizada uma análise das taxas de liberação de calor para o CO_2 presente no biogás. Portanto, no processo de otimização das taxas de reações empregado na adaptação do modelo cinético para o caso *dual-fuel*, não foram consideradas as reações químicas referentes à sua formação e/ou consumo. Além disso, considerando o modelo cinético de base, sua presença já está contabilizada nos produtos da reação 26, já considerada no modelo adaptado para o HVO puro e, conseqüentemente, para o *dual-fuel* HVO-Biogás.

Ressalta-se que todas as análises para simplificações descritas e realizadas anteriormente, foram feitas a fim de não tornar o processo extremamente custoso, além de também não ser o foco principal desse trabalho, haja visto que essa parte foi realizada apenas para prever o processo de combustão nas análises CFD com os combustíveis HVO e HVO-Biogás mais fiéis aos resultados obtidos experimentalmente e que não possuem modelos disponíveis na literatura, como ocorre para o diesel, a gasolina, o etanol e afins.

Em suma, considerando o processo adaptativo para o modelo cinético de HVO puro e *dual-fuel* de HVO com biogás, foram consideradas, respectivamente, a otimização de 8 e de 9 reações químicas, seguindo a análise anteriormente discutida.

4.4.4 Modelagem da Injeção do Combustível Primário (*Spray*)

Os combustíveis primários considerados neste trabalho foram o diesel e o HVO. Sua injeção ocorre de forma direta na câmara de combustão, como indicado nas Figuras 4 e 7. A modelagem da injeção do combustível principal é uma das partes mais importantes e, também, mais complexas ao se trabalhar com simulações de MCIs, haja visto que há uma influência direta na pressão no cilindro, na taxa de combustão, no início e no atraso da injeção e da combustão, bem como na eficiência e nas emissões.

No ANSYS Forte, a modelagem da injeção do combustível primário inclui modelos avançados que simulam a dinâmica dos *sprays* do combustível, que são compostos por uma grande quantidade de gotículas líquidas e formados durante os processos de injeção de combustível líquido. A formação e a evolução das gotículas empregam modelos de pulverização Lagrangeanos (ANSYS, 2022).

O primeiro passo no processo de modelagem do *spray* é selecionar o tipo de injetor utilizado, etapa onde devem ser fornecidas informações acerca do combustível e do *spray*. Posteriormente, modela-se o bocal do injetor, inserindo dados de sua posição espacial e diâmetro do furo. Finalmente deve-se fornecer as características de injeção tais como: início e duração, perfil de velocidade e massa do combustível injetado.

Como o injetor empregado nos testes experimentais possui quatro furos de bicos igualmente espaçados, como descrito na Tabela 7, seguindo a condição de periodicidade (um tipo de condição de contorno que será discutido na próxima seção), pode-se simular uma seção de 1/4 da câmara de combustão, ou seja, de 90°, representado nas Figuras 24 e 25, como volume representativo de toda a geometria (360°), com o intuito de reduzir o esforço computacional. Abordagens similares, seguindo a mesma condição de periodicidade, são encontrados em diversos trabalhos da literatura.

Para motores de ciclo Diesel, o injetor é modelado como um injetor cônico sólido, *Solid Injector*. Nesse modelo, deve-se fornecer as características principais do

combustível, ou seja, sua composição química (proveniente do modelo cinético e termodinâmico, carregado anteriormente), e sua temperatura na saída do furo do injetor, além do tipo de injeção, realizado na forma pulsada. Definem-se também a forma de distribuição de gotículas, que pode ser feita através de uma quantidade ou pela sua densidade e a quantidade de parcelas no spray. Foi considerada a média entre os valores padrões sugeridos pelo Forte (entre 2000 a 5000), ou seja, 3500.

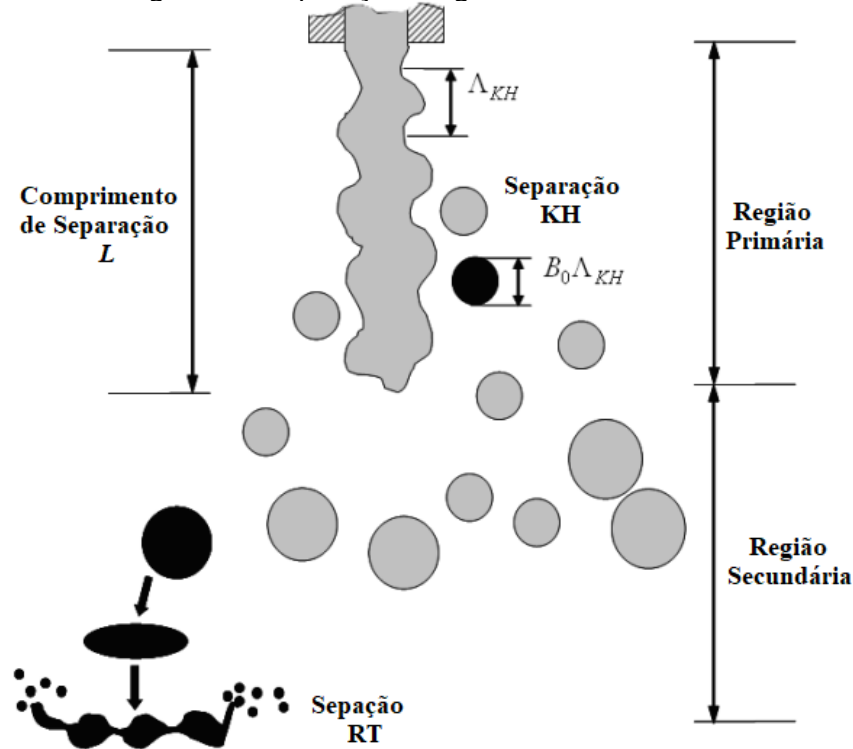
Em sequências às definições básicas do combustível injetado, deve-se fornecer as características de atomização e de gotículas, inicializando o *spray* através de um modelo de escoamento ou fornecendo os valores para o coeficiente de descarga e o ângulo de cone, como realizado nesse trabalho. Além disso, um modelo de distribuição das gotículas, que pode ser Uniforme, Rosin-Rammler ou Log-Normal, também deve ser selecionado.

Por simplificação, a inicialização das gotículas foi feita através de um valor especificado tanto para o coeficiente de descarga, adotado como 0,7, similar ao considerado por Sener *et al.* (2019), quanto para o ângulo de cone, tomado como 13,5°, o que representa o valor médio entre os sugeridos pelo software (entre 12 e 15°). O ângulo de cone sofre variações com o andamento da injeção do combustível, como descrito em Li *et al.* (2017) e, assim, sugere-se uma análise mais aprofundada desse parâmetro. Além disso, a distribuição de gotículas foi tomada como sendo uniforme, como sugerido no Guia do Usuário do Forte (ANSYS, 2022) para injetores de motores diesel.

Para descrever o processo de separação de gotículas, o Forte utiliza o modelo híbrido KH/RT (Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor). Esse modelo trata a separação de gotículas em duas regiões: uma muito próxima à saída do bocal, delimitada por um comprimento de separação, onde se considera a existência de um núcleo líquido de *sprays* de cone sólido; e outra região posterior, onde há uma redução significativa do tamanho médio das gotículas (ANSYS, 2022). Essas regiões também são denominadas *primary breakup*, separação primária, e *secondary breakup*, separação secundária, e são esboçadas na Figura 33. Na primeira região utiliza-se apenas o modelo KH, enquanto que na segunda região utilizam-se ambos em conjunto.

O modelo de Kelvin-Helmholtz descreve a região de separação do jato de combustível e baseia-se na análise de estabilidade linear de um jato de líquido, onde qualquer perturbação aplicada à interface líquido-gás contribui para uma eventual quebra e geração de novas gotículas (ANSYS, 2022).

Figura 33 – Regiões de separação de gotículas no modelo híbrido KH/RT



Fonte: Adaptado de ANSYS (2022).

A taxa de crescimento e o comprimento de onda do modo de crescimento mais rápido são descritos matematicamente pelas expressões

$$\Lambda_{KH} = 9,02 \cdot r_p \cdot \frac{(1 + 0,45 \cdot Z^{0,5})(1 + 0,4 \cdot Ta^{0,7})}{(1 + 0,87 \cdot We_g^{1,67})^{0,6}} \quad (80)$$

e

$$\Omega_{KH} = \left[\frac{\sigma}{\rho_l r_p^3} \right]^{0,5} \cdot \frac{0,34 + 0,38 We_g^{1,5}}{(1 + Z) \cdot (1 + 1,4 \cdot Ta^{0,6})} \quad (81)$$

onde Λ_{KH} é o comprimento de onda da onda de crescimento mais rápido, r_p é o raio do jato, Z , Ta e We são os números adimensionais de Ohnesorge, Taylor e Weber, respectivamente (definidos a seguir), Ω_{KH} é a taxa de crescimento de onda, σ é a tensão superficial e ρ_l é a massa específica do líquido.

Os números adimensionais são definidos por

$$Z = \frac{\sqrt{We_l}}{Re_l} \quad (82)$$

$$Ta = Z \cdot \sqrt{We_g} \quad (83)$$

$$We_g = \frac{\rho_g U_{rel} r_p}{\sigma} \quad (84)$$

onde We_l é definido similar à We_l , vide Eq. (84), trocando-se apenas a massa específica para a fase líquida e Re_l é o número de Reynolds do líquido, definido por

$$Re_l = \frac{\rho_l U_{rel} r_p}{\mu_l} \quad (85)$$

sendo μ_l a viscosidade dinâmica do líquido.

A magnitude da velocidade relativa, U_{rel} , é definida como

$$U_{rel} = |\vec{V}_{gas} + \vec{V}_{turb} - \vec{u}_d| \quad (86)$$

onde $\vec{V}_{gas}$ é o vetor velocidade da fase gasosa, $\vec{V}_{turb}$ é o vetor das flutuações da velocidade local turbulenta da fase gasosa e $\vec{u}_d$ é o vetor velocidade da gota.

O raio das novas gotas, r_c , criadas durante o processo da primeira separação, é descrito em função do comprimento de onda que possui o crescimento mais rápido pela relação

$$r_c = B_{KH} \cdot \Lambda_{KH} \quad (87)$$

onde B_{KH} é a constante de comprimento do modelo de separação KH.

O valor padrão no Forte para a constante B_{KH} é 1,0. Valores maiores para B_{KH} contribuem na formação de gotículas com maiores dimensões, o que é observado de forma direta na Eq. (87), fazendo com que o processo de vaporização seja retardado.

A formação das novas gotículas, descrita na Eq. (87), segue um processo que depende das gotas iniciais, r_p , que têm seus tamanhos característicos iniciais iguais ao diâmetro efetivo do bocal. A taxa de separação das gotículas iniciais, em novas gotículas, é descrita por

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{r_p - r_c}{\tau_{KH}} \quad (88)$$

onde τ_{KH} é uma escala de tempo do modelo de separação KH que possui relação com o comprimento e a taxa de formação da onda através da equação

$$\tau_{KH} = \frac{3,726 \cdot C_{KH} \cdot r_p}{\Lambda_{KH} \cdot \Omega_{KH}} \quad (89)$$

sendo C_{KH} a constante de tempo do modelo KH.

O manual do Forte possui uma faixa de recomendação de uso entre 20 e 80 para a constante de tempo do modelo KH, sendo que valores mais altos contribuem para o retardamento da separação de gotículas (ANSYS, 2022).

Além das constantes B_{KH} e τ_{KH} , o Forte indica também o valor de 3% como constante padrão para descrever o processo de desprendimento das novas gotículas formadas na região de separação primária, prevendo assim uma distribuição mais realista (ANSYS, 2022).

Após o comprimento de separação, próximo da saída do bocal do injetor e representado por L na Figura 33, a modelagem de separação de gotas é descrita tanto pelo modelo KH quanto pelo modelo de Rayleigh-Taylor (RT). O modelo RT considera a instabilidade que é gerada entre dois fluidos de massas específicas distintas ao se acelerarem perpendicularmente à sua interface. A frequência e o da onda de crescimento mais rápido são dados por (ANSYS, 2022)

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \cdot \frac{[-a(\rho_l - \rho_g)]^{1,5}}{\rho_l + \rho_g}} \quad (90)$$

e

$$\Lambda_{RT} = 2\pi \cdot \sqrt{\frac{3 \cdot \sigma}{-a(\rho_l - \rho_g)}} \quad (91)$$

onde a é a desaceleração devido ao arrasto.

Similar ao modelo KH, supõe-se que essa onda de crescimento mais rápido leve à quebra de gotículas, de forma que o raio da gota recém formada e o tempo de separação são descritos pelas equações

$$r_c = B_{RT} \cdot \Lambda_{RT} \quad (92)$$

e

$$\tau_{RT} = \frac{C_{RT}}{\Omega_{RT}} \quad (93)$$

onde B_{RT} e τ_{RT} são constantes de comprimento e de tempo do modelo RT.

Para a constante de comprimento, o Forte sugere uma variação entre 0,1 e 0,2 de modo que valores maiores contribuem para o retardamento da separação de gotas, sendo empregado o valor médio nesse trabalho. Por sua vez, a constante de tempo possui valor padrão de 1,0, sendo que valores maiores contribuem para a formação de gotículas com maiores diâmetros e para o retardamento da vaporização.

Similarmente ao modelo KH, vide Eq. (88), a formação de novas gotas pelo modelo de Rayleigh-Taylor também é descrita por uma equação de taxa

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{r_p - r_c}{\tau_{RT}} \quad (94)$$

Outra constante que é utilizada pelo Forte no emprego do modelo RT é a constante de distância, que pode ser ajustada para melhorar a previsão de penetração e combustão do *spray*. O valor padrão, utilizado nesse trabalho, é 1,9. Valores mais baixos fazem com que o modelo de separação secundária seja mais próximo do bocal.

O trabalho de Ribeiro *et al.* (2018) apresenta uma análise computacional 3D e detalhada de diversos modelos numéricos para separação de gotículas para o iso-octano. Sanchez, Florez e Mesa (2021) realizaram uma análise numérica da influência do tempo de separação de gotículas, considerando o modelo KH-RT na formação do *spray* de diesel e no seu processo de evaporação e combustão.

Juntamente com o processo de combustão em si, a solução dos modelos de *spray* é uma das etapas da simulação que possui mais alta demanda computacional. Assim, a utilização de modelos que contribuem na redução da dependência do tamanho da malha e do passo de tempo são bem-vindos. Nesse sentido, o Forte conta com o modelo de jato de gás, que serve exatamente para esse propósito na penetração do *spray* e na previsão do tamanho das gotículas (ANSYS, 2022).

Esse modelo baseia-se na teoria de jato de gás instável, onde a velocidade relativa, definida na Eq. (86), é modelada sem o uso de discretização na malha. A

constante que regula a utilização desse modelo possui um intervalo recomendado de variação, entre 0,3 e 0,7, de forma que valores maiores contribuem na redução do comprimento de penetração do *spray*, sendo considerado aqui o valor médio.

É importante frisar nesse momento, que há uma grande quantidade de parâmetros a serem variados na modelagem do *spray*, conseqüentemente o que torna essa uma das partes mais delicadas ao se trabalhar com a simulação de motores de combustão interna. Assim, nesse trabalho, foram empregados os valores sugeridos pelo Manual do Usuário do Forte, ou por tutoriais similares ao trabalho aqui desenvolvido, variando-se apenas constantes que possuíam uma faixa de variação ampla, ou que pudessem ocasionar grande diferença nos resultados, na parte relativa à validação do modelo 3D no processo de combustão *single-fuel* com diesel.

O próximo passo na modelagem da injeção é a representação da localização e do tamanho do bocal e da direção do *spray* na câmara de combustão através do subtópico “*New Nozzle*”. A localização do bocal e a direção do *spray* são feitas escolhendo-se o respectivo sistema de coordenada e fornecendo valores numéricos. Utilizou-se os sistemas de coordenadas indicados pelos tutoriais do Forte.

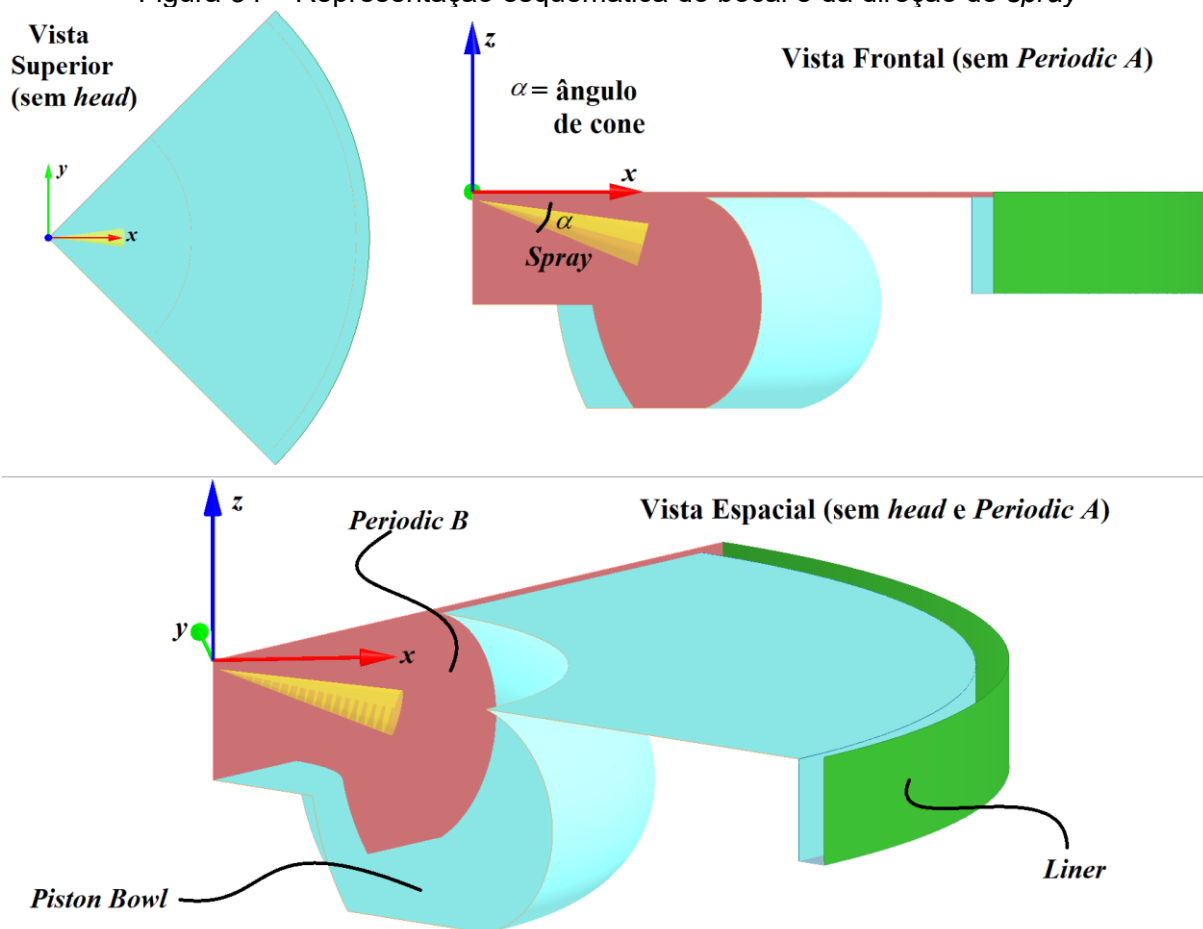
Como não há informações precisas da posição da saída do injetor no motor utilizado no experimento, considerou-se coordenadas cilíndricas com as seguintes medidas nas direções radial, $R = 0,3$ mm, azimutal, $\theta = 0^\circ$ e longitudinal $z = -0,5$ mm, como sugerido em um tutorial para simulação de um setor da câmara de combustão de um motor Diesel (ANSYS, 2022).

O diâmetro do furo do injetor foi medido através de arames comparadores no Laboratório de Metrologia da UNIFEI, cujo valor representativo foi de 0,28 mm.

A direção do *spray* foi modelada em um sistema de coordenadas esféricas com os seguintes valores: $\theta = 105^\circ$ e $\phi = 0^\circ$. O valor de θ corresponde ao ângulo de 150° formado entre dois *sprays* do combustível, como indicado no manual do motor utilizado nos experimentos (BUFFALO, 2012). O trabalho de Nazemi e Shahbakhti (2016) apresenta um estudo da influência do ângulo do *spray* em um motor RCCI.

A Figura 34 apresenta a representação espacial do bocal e da direção do *spray*, em amarelo, considerando as coordenadas globais x - y - z , para as vistas superior, frontal e 3D. Para melhor visualização, algumas faces foram ocultas.

Figura 34 – Representação esquemática do bocal e da direção do *spray*



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

O passo final na modelagem da injeção é definir as propriedades de injeção em si. Assim, cria-se um modelo de injeção em “*New Injection*”. O tipo de injeção empregado nesse trabalho é a pulsada.

O início da injeção foi fornecido na Tabela 7, a partir do manual do fabricante (BUFFALO, 2012). A duração da injeção é uma variável que não foi determinada experimentalmente, de modo que seu valor foi considerado a partir de ajustes por tentativa e erro através de diversas simulações 0-D realizadas com comparações aos resultados experimentais, na fase de validação do modelo com combustível diesel em modo *single-fuel* (ressalta-se que essa informação é de extrema relevância, haja visto que acarretará diretamente na curva de pressão no cilindro).

Por fim, modela-se o perfil de velocidade da injeção, tendo dois modelos pré-definidos: senoidal e quadrado, mas também podem ser criados outros modelos, por exemplo, que considere uma injeção piloto e uma principal, atraso de injeção etc. Deve-se também fornecer a massa total injetada de combustível a cada ciclo (considerando todos os bicos do injetor). Esse valor foi determinado considerando as

medições de vazão mássica do combustível primário obtidas experimentalmente, e a metodologia exemplificada a seguir.

A vazão mássica de combustível, $\dot{m}_c$, é dada por

$$\dot{m}_c = \frac{m_c}{\Delta t} \quad (95)$$

onde m_c é a massa de combustível e Δt é o intervalo de tempo de injeção por um ciclo, que é definido como

$$\Delta t = \frac{\text{CAD}/360}{\dot{n}/60} = \frac{\text{CAD}}{6\dot{n}} \quad (96)$$

onde CAD é o ângulo do virabrequim em graus para um ciclo e $\dot{n}$ é a rotação do motor, em rpm.

Por se tratar de um motor 4 tempos, um ciclo possui CAD = 720°. Assim, com as Eqs. (95) e (96), tem-se o cálculo da massa de combustível injetada, em kg, considerando a relação entre vazão mássica de injeção de combustível primário e a rotação do motor:

$$m_c = \dot{m}_c \cdot \Delta t = \frac{\dot{m}_c \cdot \text{CAD}}{6\dot{n}} \quad (97)$$

onde as unidades de medidas devem ser kg/s para $\dot{m}_c$, graus para CAD e rpm para $\dot{n}$.

O valor obtido através da aplicação da Eq. (97) deve ser inserido no ambiente do Forte para finalizar a modelagem da injeção.

4.4.5 Modelos de Predição de Fuligem

Para predição da fuligem, o ANSYS Forte conta com dois modelos: Modelo de Duas Etapas e Método dos Momentos.

O Modelo de Duas Etapas, *Two-Step Model*, é um modelo semiempírico que considera que apenas o acetileno é o precursor da formação de fuligem. Deve-se ajustar os valores de densidade e tamanho de partícula, bem como valores para a energia de ativação e o fator pré-exponencial da formação de fuligem, similares aos

modelos de Arrhenius, de forma que o mecanismo da cinética química da fase gasosa (inserido na etapa de modelagem da cinética química) deve conter dentre todas as espécies a fuligem (*soot*, do inglês) e seus mecanismos de formação. Foram considerados os valores padrões, descritos no Manual Teórico do Forte (ANSYS, 2022), para essas constantes.

O Método dos Momentos (*Method of Moments*) é a opção que modela a fuligem e rastreia as partículas de forma mais detalhada, prevendo o tamanho médio das partículas e a sua densidade numérica em cada célula do cálculo. Mais detalhes a cerca desse método, bem como sua descrição matemática são encontrados no Manual Teórico do Forte (ANSYS, 2022). Esse método não foi analisado nesse trabalho.

4.5 Condições de Contorno e Inicial

Como para qualquer análise de um problema físico-matemático, a solução das equações governantes é obtida considerando-se condições de contorno e condições iniciais (quando o problema é transiente). Nessa seção são descritas todas as condições empregadas nas simulações deste trabalho.

4.5.1 Condições de Contorno

Há cinco tipos básicos de condições de contorno no Forte: Fluxo de Entrada, Fluxo de Saída, Parede (que pode ser estática ou dinâmica), Periodicidade e Simetria. Na análise de combustão, que é feita considerando que todas as válvulas, de admissão e de exaustão, estão fechadas, as condições de contorno empregadas são de Periodicidade (haja visto que a análise é feita apenas em um setor da câmara de combustão, como já explicado anteriormente) e de Parede (tanto estática quanto dinâmica).

Condição de Periodicidade: esta condição é comumente empregada em análises similares à realizada nesse trabalho. Essa condição considera a existência de uma periodicidade em torno do eixo z (vide eixos descritos na Figura 25) descrita em função da quantidade de furos que o injetor possui (análise de um setor da câmara de combustão).

Assim, deve-se descrever a condição de periodicidade entre as paredes que formam essa repetição. Dessa forma, a fim de facilitar o processo de modelagem, na nomenclatura das faces já foram identificadas as paredes “*Periodic A*” e “*Periodic B*”, como representado na Figura 25, e que formam a base dessa condição de contorno. Neste trabalho, a condição de periodicidade é representada por 1/4 da câmara de combustão, ou seja, uma malha de setor de 90° que corresponde a uma periodicidade de quatro vezes ($N = 4$).

Essa condição de contorno considera esse setor com domínio $0 \leq \beta \leq 2\pi/N$, onde o ângulo de periodicidade, β , satisfaz as seguintes relações matemáticas:

$$\cos(\beta) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad \& \quad \sin(\beta) = \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}$$

Dessa forma, qualquer quantidade escalar q essa condição define que

$$q(r, \beta, z) = q(r, \beta + 2\pi/N, z)$$

e qualquer quantidade vetor $\mathbf{v}$

$$\mathbf{v}(r, \beta + 2\pi/N, z) = \mathbf{R} \cdot \mathbf{v}(r, \beta, z)$$

sendo $\mathbf{R}$ a matriz de rotação correspondente ao ângulo $2\pi/N$.

Ao definir a condição de periodicidade entre as paredes no Forte, o mesmo fornece o ângulo β entre as paredes, a fim de verificar se o ângulo de periodicidade está correto.

Condição de Parede: esta condição define as características e o comportamento das paredes na câmara de combustão. A parede pode ser estática ou dinâmica, considerar condições de deslizamento e turbulência para a equação de conservação de momento, prescrever os valores das temperaturas, ou serem adiabáticas, para a equação e energia, considerar sua rugosidade etc.

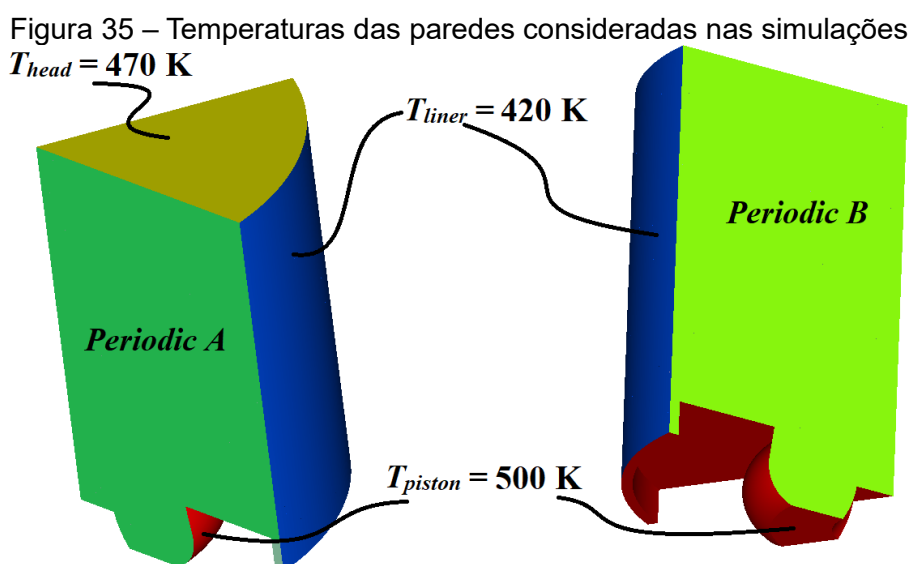
Em geral, nas simulações de motores de combustão interna, a lei da parede com velocidade turbulenta e a imposição do valor da temperatura na parede são as condições utilizadas (ANSYS, 2022).

As condições de parede foram aplicadas às paredes denominadas “*head*”, “*liner*”, “*crevice inner*”, “*crevice bottom*” e “*piston bowl*”, como representadas na Figura 25, considerando a Lei de Parede e a prescrição do valor da temperatura. As duas paredes “*head*” e “*liner*” são consideradas como estáticas e as demais (“*crevice inner*”, “*crevice bottom*” e “*piston bowl*”), que formam um único conjunto denominado “*piston*”, são paredes dinâmicas, pois realizam o movimento desde o ângulo do virabrequim do

início da simulação até o ângulo do virabrequim do final da simulação, no intervalo $-122^\circ \leq \phi \leq 144^\circ$, esses ângulos são definidos nas condições iniciais do problema.

A Figura 35 apresenta a câmara de combustão na posição de início das simulações, com ângulo do virabrequim a -122° , e suas respectivas condições de contorno para a temperatura, destacadas por cores distintas para melhor compreensão. A escolha dessas temperaturas foi feita considerando o tutorial de um problema similar (ANSYS, 2022). Valores diferentes para as temperaturas nas paredes da câmara de combustão também são empregados em diversos trabalhos na literatura, como Prasad *et al.* (2011), Wei *et al.* (2013) e Balijepalli *et al.* (2021). Ressalta-se que a variação desses valores acarretará em algumas modificações nos resultados, no entanto como não há medições experimentais realizadas no motor Buffalo BFDE 10.0, decidiu-se por escolher os fornecidos nos tutoriais do software.

Para a parede dinâmica, *piston*, deve-se fornecer a direção do movimento, no caso no eixo *z*, e os valores do curso do pistão, *stroke*, do comprimento da biela, *connecting rod length*, ambos descritos na Tabela 7 e do deslocamento do pistão, *piston offset*, que é nulo.



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

4.5.2 Condições Iniciais

Por se tratar de um problema transiente, condições iniciais devem ser fornecidas: composição da mistura do oxidante, pressão, temperatura, condições de turbulência e velocidade.

As condições iniciais básicas são de pressão e de temperatura. Os valores de pressão foram obtidos diretamente nos experimentos realizados no Projeto ROTA 2030 para todos os combustíveis e misturas considerados nesse trabalho. Por sua vez, os valores de temperatura foram estimados através do modelo teórico, descrito na Seção 3.1.4.

A turbulência foi inicializada através da energia cinética turbulenta e do comprimento de escala, considerando os valores padrões fornecidos pelo *software*.

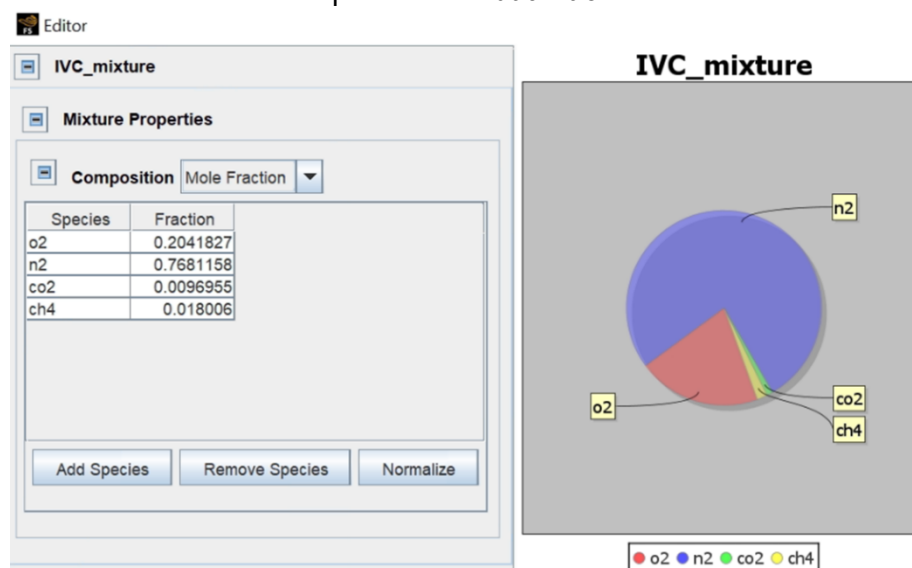
A velocidade foi inicializada considerando o movimento de turbilhão, *swirl*, no ar que entra na câmara de combustão, fornecendo seu fator de perfil inicial tomado como constante e igual a 3,11 como recomendado no Manual do Forte (ANSYS, 2022) e a razão de *swirl* inicial, tomada como 1,2, mas que pode ser ajustada para se obter a validação da curva de pressão no cilindro. A inicialização da velocidade de turbilhão, movimento de *swirl*, é feita na direção normal à parede “*piston*” definida anteriormente nas condições de contorno. Trabalhos como os de Karuppa Raj e Manimaran (2012) e Wei *et al.* (2013), por exemplo, apresentam uma análise numérica do efeito da razão de *swirl* em motores Diesel.

Além disso, deve-se também fornecer a composição da mistura de oxidante, que pode ser descrita de forma direta, criando-se uma mistura gasosa. De forma geral, para simplificação, considerou-se o ar composto por uma mistura com 21% de oxigênio e 79% de nitrogênio, em termos de fração molar.

No caso da combustão *dual-fuel*, como a injeção do combustível secundário foi feita no tubo de admissão, a mistura oxidante possui também a presença desse combustível. A forma com que a sua fração molar foi calculada foi apresentada na Seção 4.4.3.1 e a mesma deve ser considerada nessa etapa da modelagem, além das frações molares de O₂ e N₂.

A Figura 36 apresenta forma como a mistura dos fluidos presentes no início das simulações é definida para o caso *dual-fuel*, considerando uma mistura com 0,2 kg/h de biogás. Para o caso *single-fuel* a definição é similar, porém a fração molar de O₂ será igual a 0,21 e de N₂ igual a 0,79, enquanto que para as demais espécies devem ser excluídas.

Figura 36 – Definição da mistura inicial dos gases na câmara de combustão (IVC *mixture*) para o caso *dual-fuel*



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

4.6 Controles da Simulação e Métodos de Solução

Nessa etapa, inicialmente, são definidos os limites temporais da simulação, em termos dos ângulos do virabrequim inicial e final, bem como a rotação do motor, o diâmetro do pistão e o tipo do ciclo do motor, no caso de 4 tempos.

Além disso, são definidas as características para as soluções, em termos de avanço temporal e de tolerância para os métodos empregados para convergência das soluções numéricas das equações de transporte, turbulência e reações químicas.

O Forte utiliza um avanço temporal para o problema de forma adaptativa a fim de maximizar a eficiência, a precisão e a estabilidade da solução. O passo temporal a cada ciclo n (sendo $n = 0, 1, 2, \dots$), é definido como $\Delta t^n = t^{n+1} - t^n$, devendo-se fornecer um passo temporal inicial, Δt^0 , que serve como base para a adaptação dos demais passos temporais.

Pode-se definir limites máximo e mínimo para o passo temporal. O limite máximo foi escolhido em função do avanço máximo requerido para o ângulo do virabrequim, considerando a relação

$$\Delta CAD = 6 \cdot \dot{n} \cdot \Delta t \quad (98)$$

onde ΔCAD é a variação do ângulo do virabrequim, em $^\circ$, em um intervalo de tempo Δt , em s, e $\dot{n}$ é a rotação do motor, em rpm.

Por exemplo, considerando um avanço de $0,5^\circ$ no ângulo do virabrequim (similar ao mensurado experimentalmente), para um motor operando a 1800 rpm, tem-se que $\Delta t \cong 4,630 \cdot 10^{-5}$ s.

O limite mínimo para o passo temporal não foi estipulado pois há regiões, especialmente àquelas próximas à injeção do combustível primário e do seu processo de queima, onde esses valores são muito pequenos para se alcançar a acurácia na solução das equações de transporte e de reação química, o que faria com que as simulações fossem finalizadas sem completar todo o domínio estipulado para análise.

A taxa de crescimento do passo temporal é controlada através de diversos fatores, como fator de crescimento de passo de tempo, de aceleração do fluido, de taxa de tensão, convecção e energia interna. Todos esses controladores possuem um certo limite sugerido a fim de se manter uma solução que pode ser mais rápida, ou lenta, fornecendo resultados mais, ou menos, acurados, além de se manter ou não a estabilidade do problema. Como não é o intuito desse trabalho fazer essas análises, todos os valores foram mantidos dentro dos padrões sugeridos no próprio *software*.

A cada passo de tempo, para cada ciclo Δt^n , o Forte faz uma subdivisão da solução em três etapas:

- Etapa 1: são solucionados os termos de origem química e de spray nas equações de transporte, de energia e de espécies, baseados em coordenadas Lagrangeanas onde as células movem-se com o fluido e as gotículas de *spray* são seguidas através de processos de colisão, oscilação e de separação, juntamente com termos de massa e de energia (ANSYS, 2022).
- Etapa 2: são obtidas soluções implícitas e acopladas para o gradiente de pressão na equação de conservação de quantidade de movimento linear e para os termos de dilatação de velocidade nas equações de transporte de massa e de energia, além de soluções para os termos fonte na equação de momento para o spray e os termos devido à difusão de massa, momento e energia (ANSYS, 2022).
- Etapa 3: é feito um rezoneamento onde o escoamento é “congelado” e remapeado em uma malha computacional onde o movimento de parede é considerado. Faz-se então o cálculo do transporte convectivo a partir dos resultados obtidos pela malha Lagrangeana para a malha revisada, em relação ao fluido (ANSYS, 2022).

Os controles para o *solver* relacionados à parte de reações químicas foram mantidos considerando as tolerâncias absoluta e relativa, especificados em 10^{-12} e 10^{-5} , respectivamente. Há também diversas opções nessa parte que podem reduzir o tempo de simulação empregado nessa parte e, ainda, modular a taxa de liberação de calor química considerando os efeitos da mistura turbulenta. No entanto, a utilização de algumas técnicas, como a análise química adaptativa, é sugerida apenas quando a cinética química é descrita considerando uma grande quantidade de espécies e reações, que não é o caso considerado nesse trabalho.

Uma opção que acelera a parte relativa ao *solver* químico é a opção de agrupamento de células que são cineticamente semelhantes (ANSYS, 2022). Sugere-se a utilização de dois tipos de agrupamento de células, em função das máximas dispersões relacionadas à temperatura e à razão de equivalência.

Há também a opção de desativar a solução relativa às reações químicas em regiões onde sua solução não se faz necessária, como por exemplo, antes da injeção de combustível. Para tal, seleciona-se a opção de ativação da parte química em um intervalo para o ângulo do virabrequim que seja compreendido a partir da injeção do combustível.

O Forte discretiza as equações governantes do problema, vide Seção 4.4, através do método dos volumes finitos, transformando-as em equações algébricas solucionadas a partir de técnicas implícitas e iterativas (haja visto que, para solução das equações de transporte, há necessidade do gradiente de pressão, que é desconhecido e depende dos valores de velocidade e de aceleração).

O acoplamento do termo de pressão é feito através de uma versão modificada do método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) que resolve as variáveis do campo de escoamento em duas etapas, extrapolando-se a pressão se obtém iterativamente uma solução para as velocidades, depois para a temperatura e finalmente para a pressão (ANSYS, 2022). Um esquema do procedimento de solução empregado pelo método SIMPLE é encontrado em Sener *et al.* (2019). Os termos convectivos são solucionados pelo método *Quasi-Second-Order Upwind* (QSOU). Informações mais detalhadas sobre os métodos de discretização e solução das equações governantes estão descritos no Manual Teórico do ANSYS Forte (ANSYS, 2022).

Em relação aos controladores dessa parte de transporte de massa e de energia, estipulam-se valores para a tolerância na análise da convergência das

soluções numéricas dos termos de difusão de massa, *momentum*, calor, energia cinética e taxa de dissipação turbulentas, além da tolerância para a solução do termo de pressão e do método SIMPLE. Além disso, estipulam-se também a quantidade máxima de iterações para se obter a convergência desejada a cada passos de tempo Δt^n . Caso a convergência não seja atingida considerando essas quantidades máximas de iterações, o Forte realiza uma estratégia de redução do passo temporal considerado e refaz os cálculos até que se obtenha soluções acuradas considerando os valores estipulado nas tolerâncias.

No monitoramento das soluções, que é feito em tempo real, pode-se acompanhar, além das soluções, o valor do passo temporal e a qual restrição ele está relacionado, ou se seu valor está crescendo ou reduzindo. Além disso, gera-se um gráfico da variação do passo temporal *versus* ângulo do virabrequim.

A variação dos passos temporal e espaciais e das velocidades controlam o número de Courant, que verifica a estabilidade do problema. Para problemas solucionados considerando uma discretização implícita o número de Courant máximo, $C_{máx}$, pode ser acima de 1, haja visto que esse tipo de discretização é menos sensível à questão de estabilidade, já para uma discretização explícita: $C \leq C_{máx} = 1$. O número de Courant para um problema 3D é definido como

$$C = \Delta t \cdot \left(\frac{u_x}{\Delta x} + \frac{u_y}{\Delta y} + \frac{u_z}{\Delta z} \right) \quad (99)$$

onde C é o número de Courant, u_x , u_y e u_z são as componentes da velocidade nas direções x , y e z e Δx , Δy e Δz são os passos espaciais nas direções x , y e z .

4.7 Demais Configurações e Controles da Simulação

Após as configurações essenciais para rodar uma simulação, podem ser selecionados alguns controles para gerir os resultados, e visualizar rapidamente o movimento do pistão durante as simulações.

Na seção “*Outputs Controls*” é selecionada a frequência de salvamento das variáveis e quais espécies e variáveis serão monitoradas e salvas nos arquivos gerados após as simulações. A frequência de salvamento é que definirá o tamanho do arquivo e a qualidade para construção de gráficos e perfis de pressão, temperatura, velocidade, rastreamento da injeção, espécies químicas consideradas nas emissões

etc. A fim de se obter uma quantidade de dados similar à obtida experimentalmente, considerou-se a frequência de salvamento a cada $0,5^\circ$ do ângulo do virabrequim.

O Forte conta com algumas ferramentas importantes para verificar se a configuração da simulação está correta, a primeira está relacionada com a validação do problema. Esta opção verificará se as configurações estão corretas ou se há algum erro em alguma parte, indicando onde deve ser realizada alguma correção, reconfigurado o problema. Outra ferramenta é a “*Preview Simulation*”, que permite visualizar a movimentação do pistão dentro dos limites estabelecidos nos controles da simulação, na opção “*Boundary Motion*”, também pode-se visualizar a geração da malha automática criada pelo Forte através do ANSYS Enight, na opção “*Mesh Generation*”. Outra ferramenta, já mencionada anteriormente é o “*CR Utility*” que traz uma prévia do valor da razão de compressão do motor, que será confirmada posteriormente ao final das simulações.

Na aba “*Run Settings*” podem ser realizadas algumas configurações básicas para a simulação, como selecionar a configuração serial ou paralela do uso da memória do computador, bem como determinar a quantidade máxima de estudos paramétricos realizados por vez (a fim de limitar o uso da CPU e da memória do computador).

Realizadas todas as configurações e possíveis verificações de erros e afins, coloca-se a simulação e/ou estudos paramétricos para rodar na aba “*Run Simulation*”.

4.8 Monitoramento da Simulação

O monitoramento das soluções obtidas pelo Forte é feito em tempo real através da ferramenta “*Forte Monitoring*” presente na aba “*Run Simulation*”. Na janela de monitoramento do Forte, há diversas opções de monitoramento das variáveis do problema em função do ângulo do virabrequim. Essas opções são divididas em diversas categorias e cada uma gerará um arquivo no formato CSV para posterior utilização.

Dentre as categorias, tem-se às relacionadas: ao solver da parte química do problema; à parte da dinâmica do movimento do pistão; aos diagnósticos relacionados ao fluido, ao uso da memória, à malha e às partições; às frações mássicas e molares das espécies químicas (N_2 , O_2 , CO_2 , H_2O , CO , NO , NO_2 , Combustível, Hidrocarbonetos Não-queimados, Voláteis, NO_x e Fuligem); à análise do *spray*; à

análise da parte termodinâmica; aos parâmetros de contorno de parede e de todo o domínio.

4.9 Pós-processamento

O pós-processamento dos resultados é feito basicamente em duas etapas:

- 1) Visualização dos gráficos das diversas variáveis e parâmetros de análise da simulação, descritos na Seção 4.8, em função do ângulo do virabrequim. De fato, essa visualização é feita de modo real através do “*Forte Monitoring*” durante a simulação, mas também pode ser feita através dos arquivos nos formatos CSV gerados, a fim de se comparar com dados experimentais e/ou da literatura e, ainda, com resultados de outras simulações e/ou de análises paramétricas.
- 2) Visualização 3D dos campos de velocidade, temperatura, espécies químicas etc. Essa etapa é feita através do Enight ou do CFD-Post. Nessa etapa podem ser gerados gráficos 2D/3D estáticos ou dinâmicos (animações), podendo ser visualizada a injeção do combustível primário etc.

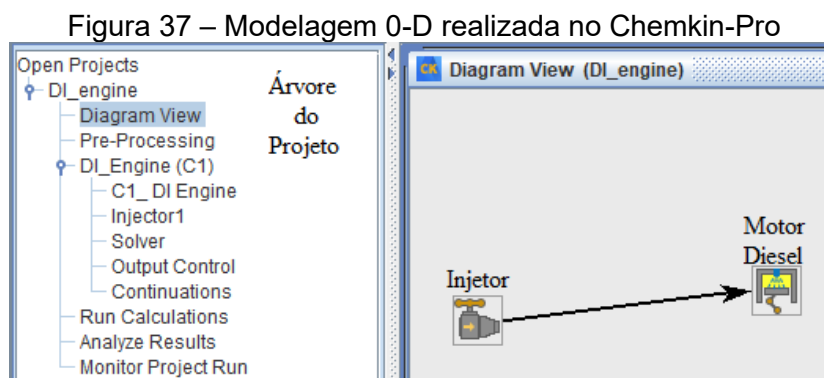
4.10 Modelagem 0-D no Chemkin-Pro

Para obtenção dos modelos cinéticos adaptados para a combustão *single-fuel* com injeção primária do HVO e para a combustão *dual-fuel* com HVO e Biogás, além da pré-validação do modelo D35sp para o diesel e obtenção de alguns parâmetros não mensurados experimentalmente, considerou-se a construção de um modelo 0-D no *software* Chemkin-Pro, também da ANSYS.

Diversos dados essenciais às simulações e que não foram mensurados experimentalmente, como a duração da injeção, a distância do bico do injetor à parede superior, “*head*”, da câmara de combustão, o perfil de injeção, a temperatura das paredes, a temperatura de entrada do combustível primário, o ângulo de cone etc., podem ser analisados de forma mais rápidas a partir desse modelo 0-D.

Essa abordagem foi feita pois esse modelo é o mais simples dentre todos empregados na modelagem/simulação de motores de combustão interna, como discutido na Seção 2, e, por isso, sua resposta é rápida e de baixo custo-computacional, tornando-se ideal nessa etapa do trabalho.

O modelo construído é apresentado na Figura 37 e trata-se de um reator fechado de injeção direta de combustível de ciclo Diesel, com os parâmetros descritos na Tabela 7, e considerando os dados experimentais descritos na Seção 5.1 deste trabalho, nas abas “C1_DI Engine” e “Injector1” da árvore do projeto, vide Figura 37.



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Informações mais completas da construção desse modelo, bem como a definição de parâmetros opcionais e de transferência de calor foram utilizados dos valores padrões já presentes no modelo original existente na biblioteca do ANSYS Chemkin-Pro e no tutorial para tal modelagem (ANSYS, 2022).

Ressalta-se que nesse tipo de abordagem, que é mais simples, todas as paredes do domínio computacional e são referentes às condições de contorno de primeiro tipo (temperatura prescrita), possuem as mesmas temperaturas, T_{wall} , que foi dada como sendo próxima à média das temperaturas apresentadas na Figura 35.

Ressalta-se que os parâmetros considerados nesse tipo de análise são provenientes de um motor Diesel que opera em regime LTC (*Low Temperature Combustion*) modelo Sandia (ANSYS, 2022), que não é o mesmo utilizado nos experimentos do projeto ao qual este trabalho está vinculado, podendo assim gerar resultados computacionais com algumas diferenças em relação aos experimentais.

4.11 Bancada Experimental

Os testes experimentais foram conduzidos no projeto de pesquisa do ROTA 2030, mencionado na Seção 1.1. Os resultados obtidos nesses testes foram utilizados como base para dados de entrada e de modelagem das simulações computacionais aqui realizadas, bem como comparações entre as curvas computacional e experimental.

A bancada de testes experimentais conta com um motor monocilíndrico de ignição por compressão, cujas características principais foram apresentadas na Tabela 7, instrumentado e acoplado a um freio hidráulico, tendo seus projetos de componentes, instrumentação, usinagem e soldagem das peças realizados no trabalho de doutorado de Da Costa (2021).

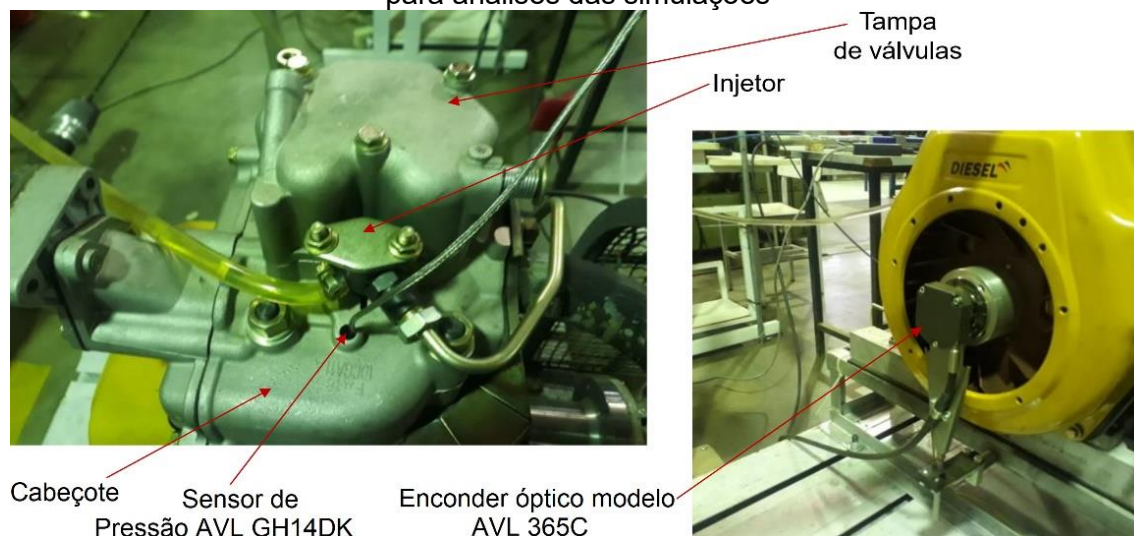
Os dados experimentais foram obtidos da média de duzentos ciclos coletados para cada condição de teste (DA COSTA, 2021). O dado mais importante na análise do processo de combustão, realizado nesse trabalho e obtido experimentalmente, foi a pressão no interior da câmara de combustão. Sua medição experimental foi realizada por um transdutor piezoelétrico modelo AVL GH14DK (incerteza de medição $< \pm 0,3\%$) que opera em conjunto com um medidor angular óptico acoplado ao virabrequim do motor modelo AVL 365 C que realizou as medições do ângulo do virabrequim (incerteza de medição $< \pm 0,03\%$) e da rotação do motor (incerteza de medição $< \pm 3$ rpm) (DA COSTA, 2021).

A vazão mássica de ar no tubo de admissão foi mensurada através de um sensor termal calibrado modelo Bosch HFM 5 (incerteza de medição $< \pm 1,0\%$). Por sua vez, um medidor volumétrico Classe A do fabricante Alpax (incerteza de medição $< \pm 0,1\%$) foi considerado para medir o consumo de combustível do motor e, a partir do tempo de consumo e da massa específica de cada combustível, obteve-se a vazão mássica de cada combustível por ciclo (DA COSTA, 2021).

A Figura 38 apresenta uma imagem do motor instrumentado utilizado para obter os dados experimentais, evidenciando onde os medidores de pressão no cilindro e do ângulo de virabrequim foram posicionados.

Uma descrição completa e detalhada sobre a bancada de testes e todos os equipamentos utilizados durante os experimentos e seu funcionamento são encontrados em Da Costa (2021) e Da Costa *et al.* (2022).

Figura 38 – Motor instrumentado utilizados nos testes experimentais que serviram de base para análises das simulações



Fonte: Da Costa (2021).

O diesel utilizado nos testes experimentais é do tipo S10, enquanto que o HVO utilizado foi doado pela NESTE Corporation sob o nome comercial mencionado na Seção 3.2.2. Por sua vez, o biogás foi obtido a partir de uma mistura de metano e dióxido de carbono nas proporções de 65% e 35%, respectivamente.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Essa seção dedica-se à apresentação dos resultados obtidos nesse trabalho, bem como análise dos mesmos. Para fins didáticos e de evolução no decorrer dessa pesquisa, inicialmente são apresentados os resultados experimentais que serviram de base para as entradas e comparações das simulações computacionais. Posteriormente, são apresentados os resultados computacionais, subdivididos em relação aos combustíveis e misturas utilizados nas simulações computacionais: Diesel Puro, HVO Puro e Mistura de HVO com Biogás.

5.1 Dados e Resultados Obtidos Experimentalmente

Os dados experimentais utilizados nesse trabalho foram obtidos a partir de testes realizados no motor monocilindro indicado na Figura 22, cujas principais características foram descritas na Tabela 7, e com os instrumentos descritos na Seção 4.11. Os experimentos compreenderam o intervalo $-360^\circ \leq \text{CAD} \leq 360^\circ$ (ciclo 4 tempos completo). Porém, como esse trabalho simula apenas a parte relativa à combustão, os dados experimentais de interesse estão entre as posições de fechamento da válvula de admissão e de abertura da válvula de exaustão: $-122^\circ \leq \text{CAD} \leq 144^\circ$. Esses dados compreendem: pressão e temperatura iniciais (para as condições iniciais); vazão mássica dos combustíveis primários (para cálculo da massa de combustível injetado); vazão mássica do combustível secundário e vazão mássica de ar (para cálculo da fração molar do combustível injetado no tubo de admissão). A Tabela 11 sintetiza esses dados para todos os combustíveis e misturas considerados (as misturas de HVO com biogás são diferenciadas por um número entre parênteses que se refere à vazão mássica de injeção do combustível secundário). As medições experimentais diretas foram de pressão inicial, p_0 , e vazões mássicas do ar, $\dot{m}_{ar}$, e dos combustíveis primário, $\dot{m}_{cp}$, e secundário, $\dot{m}_{cs}$. A temperatura inicial, T_0 , a massa injetada de combustível primário, m_{cp} , e as frações molares das espécies químicas no início das simulações, x_{O_2} , x_{N_2} , x_{CH_4} e $\tilde{x}_{CO_2}$, foram obtidas respectivamente pelas Eqs. (35), (97) e (79).

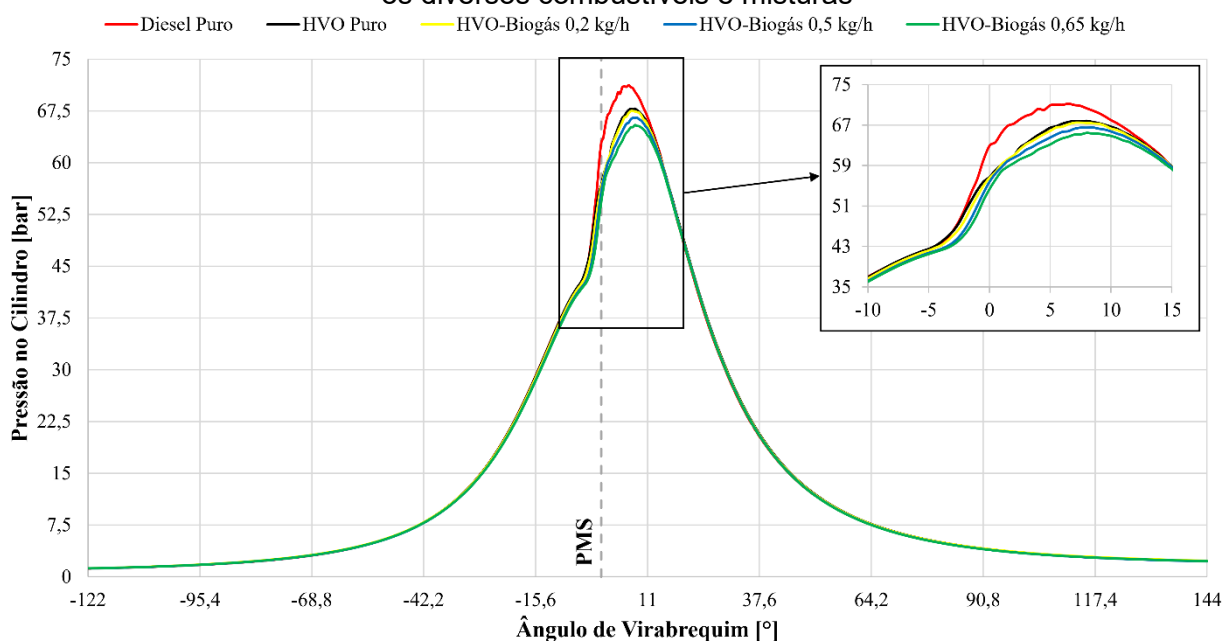
Tabela 11 – Síntese dos dados experimentais utilizados nas simulações

Combustível ou Mistura	Diesel Puro	HVO Puro	HVO com Biogás (0,2)	HVO com Biogás (0,5)	HVO com Biogás (0,65)
p_0 [bar]	1,184	1,196	1,213	1,194	1,209
T_0 [K]	384,321	385,896	380,530	379,131	382,782
$\dot{m}_{ar}$ [kg/h]	19,900835	19,963369	20,377967	19,900520	19,598277
$\dot{m}_{cp}$ [kg/h]	0,6960639	0,6675557	0,6447857	0,5270608	0,4573672
m_{cp} [mg]	12,890072	12,362143	11,940476	9,760385	8,469763
$\dot{m}_{cs}$ [kg/h]	0	0	0,200	0,500	0,650
x_{O_2} [--]	0,21	0,21	0,207721	0,204263	0,202493
x_{N_2} [--]	0,79	0,79	0,781427	0,768419	0,761758
x_{CH_4} [--]	0	0	0,007054	0,017757	0,023237
x_{CO_2} [--]	0	0	0,003798	0,009561	0,012512

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A Figura 39 apresenta as curvas de pressão no cilindro, para o diesel e o HVO puros e para todas as misturas de HVO com biogás com as respectivas vazões mássicas de biogás, testados experimentalmente.

Figura 39 – Variação experimental da pressão no cilindro *versus* ângulo do virabrequim para os diversos combustíveis e misturas



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A partir da Figura 39, nota-se que a combustão de HVO puro apresenta uma redução no pico de pressão no cilindro, o que também é observado ao se adicionar biogás à mistura HVO-Biogás, que pode ser explicado devido à menor massa de

combustível injetada por ciclo para os casos *dual-fuel*, como apresentado na Tabela 11, o que contribui diretamente para essa redução.

Além disso, a introdução de biogás na mistura com HVO contribuiu diretamente para o atraso na ignição, ou seja, quanto maior a quantidade de biogás na mistura, maior o atraso de ignição, o que é observado pela translação da curva de pressão no cilindro para a direita, e pode ser explicado devido ao fato de o biogás possuir poder calorífico 50% menor que o HVO (vide Tabelas 2 e 4), além de se ter uma menor quantidade de combustível primário, no caso o HVO, e maior quantidade de combustível secundário, no caso biogás, que substitui a quantidade de oxigênio na câmara de combustão e contribui para o retardamento da formação de uma mistura mais inflamável, o que torna-se mais acentuado devido à presença de CO₂, que é um gás inerte presente na composição do biogás.

As curvas de pressão no cilindro obtidas experimentalmente foram utilizadas para adaptação dos modelos cinéticos para o HVO puro e para a mistura *dual-fuel* HVO-Biogás e para validação do modelo computacional 3D.

5.2 Combustão *Single-fuel* com Diesel

A combustão *single-fuel* para o diesel foi considerada tanto para a validação do modelo cinético D35sp, detalhado no ANEXO A e apresentado na Seção 4.4.3, empregando uma abordagem do tipo 0-D desenvolvida no Chemkin-Pro, quanto para a abordagem 3D desenvolvida no Forte.

Considerou-se em todas as simulações: rotação constante de 1800 rpm para a operação do motor; perfis de injeção quadrados, haja visto que não foram mensurados experimentalmente; duração da injeção ajustada através de análise do modelo 0-D, descrito anteriormente na Seção 4.10; temperaturas do combustível e das paredes obtidas a partir de dados na literatura ou de tutoriais similares à análise realizada nesse trabalho.

5.2.1 Resultados da Análise 0-D

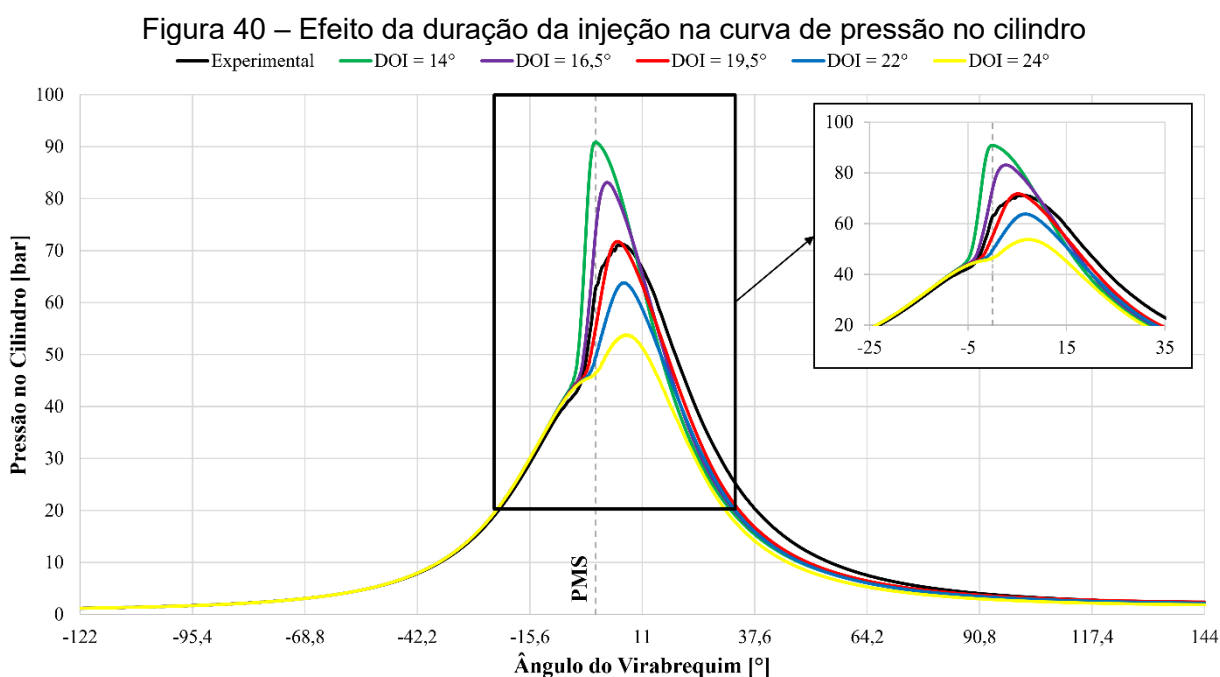
Como descrito anteriormente, esse tipo de análises serviu para obtenção de alguns parâmetros de extrema relevância nas simulações e que não foram mensurados experimentalmente. Ressalta-se também que tal abordagem foi

empregada devido ao fato de o motor considerado no trabalho e no projeto de pesquisa, ao qual este trabalho é vinculado, não possuir dados na literatura e, também, por ser esta uma abordagem com menor custo computacional.

As simulações 0-D foram realizadas em um computador com sistema operacional Windows 10 de 64 bits, com memória RAM de 16,0 GB e processador Intel Core i7-2600 CPU @ 3.40 GHz na versão 2021 R1 do ANSYS Chemkin-Pro.

5.2.1.1 Análise do efeito da duração da injeção

A duração de injeção (DOI – *Duration Of Injection*, do inglês), é um parâmetro relevante no perfil da curva de pressão no cilindro, principalmente no seu valor máximo. Para análise do efeito da DOI, além dos dados experimentais considerou-se os valores padrões do Chemkin-Pro para a temperatura do combustível e das paredes, 368 K e 460 K, respectivamente. A Figura 40 compara as curvas de pressão no cilindro obtidas pelo modelo 0-D, para diferentes DOI, com a curva experimental.

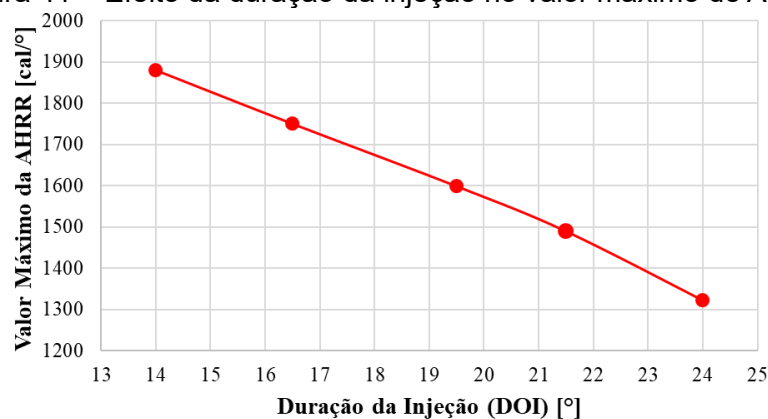


Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Analisando a Figura 40, nota-se claramente o que foi comentado previamente: que a duração da injeção influencia no valor máximo de pressão no cilindro, e de forma indireta, ou seja, quanto maior o valor da DOI, menor será o valor do pico de pressão. Observa-se também que quanto menor for a DOI, mais deslocada para a esquerda estará a curva de pressão no cilindro, indicando um adiantamento no início da

combustão (SOC – *Start Of Combustion*, do inglês), ou início da ignição. Além disso, verificou-se também que o aumento na duração da injeção acarreta na redução do valor máximo da taxa de liberação de calor (AHRR – *Apparent Heat Release Rate*, do inglês), como esboçado na Figura 41, considerando os diferentes valores estimados para a duração da injeção. Isso deve-se ao fato de maiores durações de injeção do combustível primário reduzirem a eficiência da combustão, haja visto que para uma mesma quantidade de combustível, sua distribuição ao longo do tempo será menor, acarretando na redução da eficiência da combustão e, conseqüentemente, do pico de pressão no cilindro e da taxa de liberação de calor e nas emissões de poluentes.

Figura 41 – Efeito da duração da injeção no valor máximo de AHRR



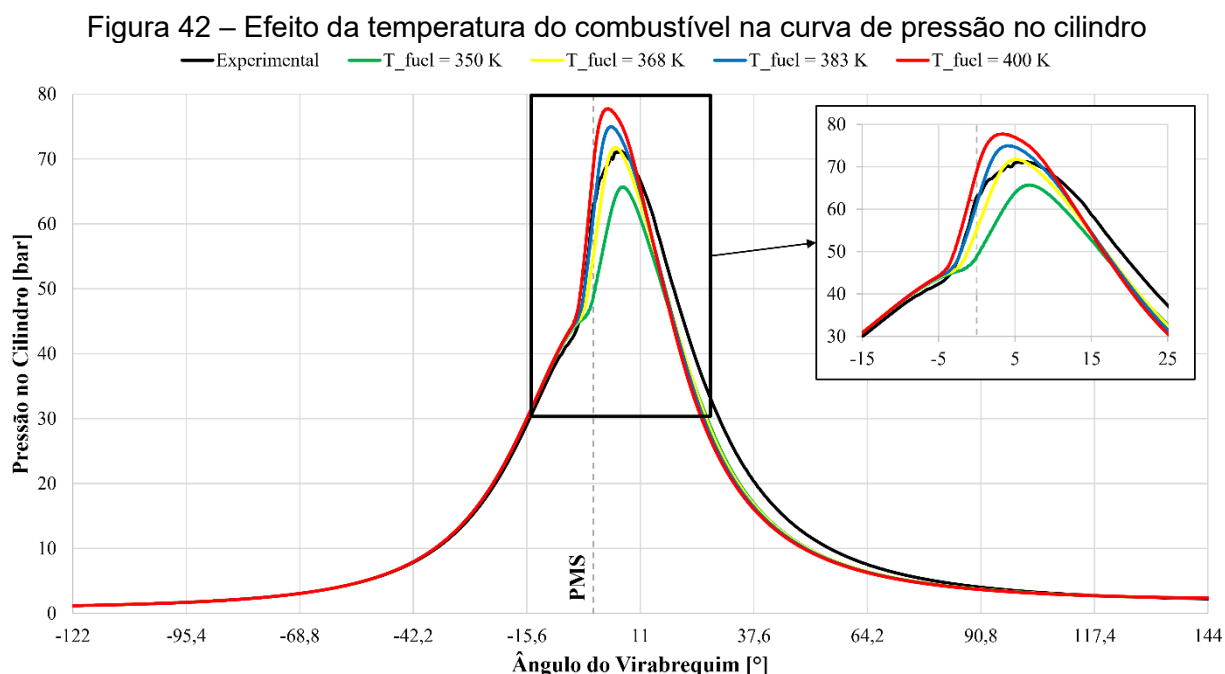
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A partir da análise dos efeitos da duração de injeção realizada considerando o modelo 0-D, nota-se que o melhor ajuste entre as curvas experimental e computacional é obtido quando DOI = 19,5°, de modo que esse valor será considerado como duração da injeção nas simulações 3D, bem como no processo de adaptação dos modelos cinéticos. Note que esse valor é justificável haja visto que, segundo Pulkabek (2013), para motores de ciclo Diesel, o tempo de injeção é geralmente em torno de 20° do ângulo do virabrequim.

5.2.1.2 Análise do efeito da temperatura do combustível

Assumiu-se para essa análise, quatro valores para a temperatura do combustível, T_{fuel} , na saída do injetor, sendo um deles presente no modelo 0-D do Chemkin-Pro e outro considerado no tutorial de análise de combustão de um setor realizada no Forte (ANSYS, 2022): 368 K e 400 K, respectivamente, os outros dois

valores considerados foram 350 K e 383 K. A Figura 42 apresenta as curvas de pressão no cilindro considerando diferentes temperaturas do combustível e as compara com a curva obtida experimentalmente.



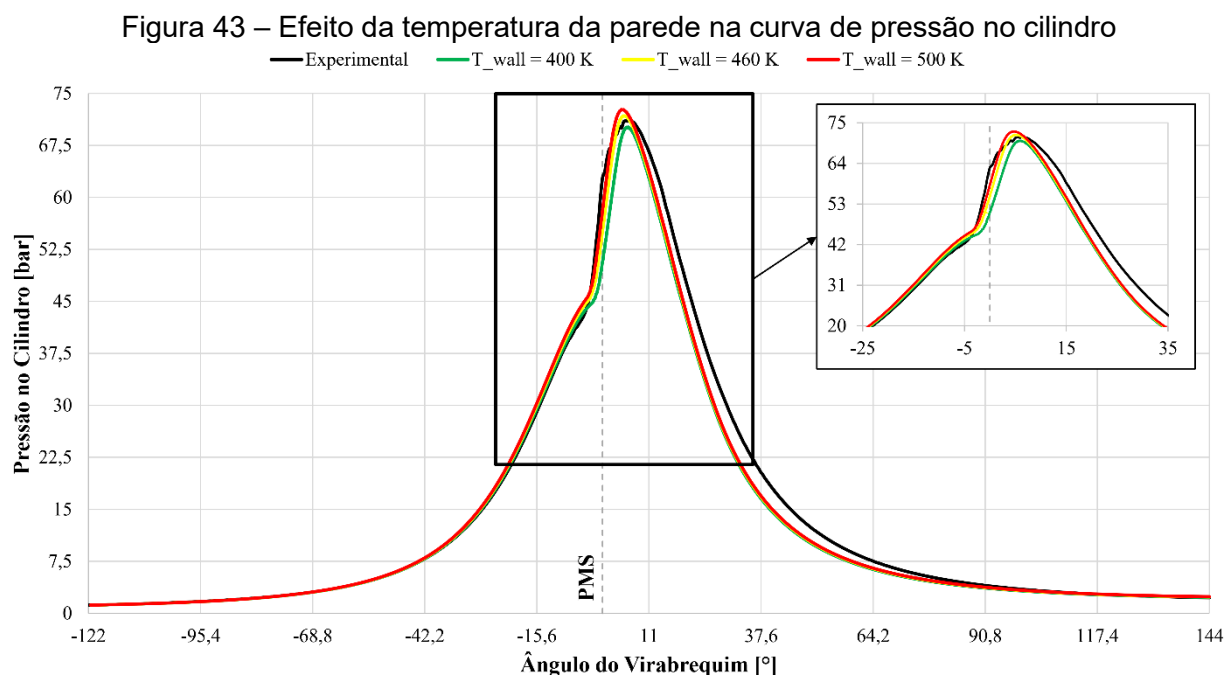
Analisando a Figura 42, nota-se que quanto maior T_{fuel} , maior será o pico da pressão no cilindro e, também, mais deslocada para a esquerda estará a curva de pressão, indicando que o aumento na temperatura do combustível provoca um adiantamento no início da combustão, o que já era esperado, haja visto que maior T_{fuel} mais rápida será a sua ignição.

5.2.1.3 Análise do efeito da temperatura na parede

Foram considerados três valores para verificar quais os efeitos da temperatura na parede, T_{wall} , na curva de pressão no cilindro. O primeiro considerado foi o presente no modelo original para simulação do MCI de ciclo diesel do Chemkin-Pro: $T_{wall} = 460\text{ K}$; o segundo valor considera a temperatura no pistão de um tutorial do Forte (ANSYS, 2022) de análise de combustão em um setor da câmara de combustão de um motor Diesel: $T_{wall} = 500\text{ K}$, caso que considera as temperaturas apresentadas na Figura 35; e o terceiro valor foi empregado do trabalho de Sener *et al.* (2019):

$T_{wall} = 400$ K, que também foi realizado no Forte e que considera todas as paredes com a mesma temperatura.

Nessa análise, considerou-se além dos dados experimentais, a duração de injeção igual a $19,5^\circ$ e a temperatura de injeção do diesel igual a 368 K. A Figura 43 apresenta a variação da pressão no cilindro para diferentes valores da temperatura na parede, comparando com a curva experimental.



Analisando-se a Figura 43, nota-se que o aumento de T_{wall} acarreta em um aumento, embora pequeno, no valor máximo da pressão no cilindro e um tênue deslocamento da curva pressão no cilindro para a esquerda, contribuindo para o início adiantado da combustão, o que já era esperado, haja visto que maiores temperaturas nas paredes da câmara de combustão resultam em maior temperatura interna dos fluidos na câmara de combustão e, consequentemente, um adiantamento no início da ignição, mesmo que de forma sutil.

A partir das análises realizadas no modelo 0-D, adotou-se nas simulações 3D os seguintes parâmetros: DOI = $19,5^\circ$ e $T_{fuel} = 368$ K. Já para a temperatura nas paredes, considerou-se um valor para cada face, como apresentado na Figura 35.

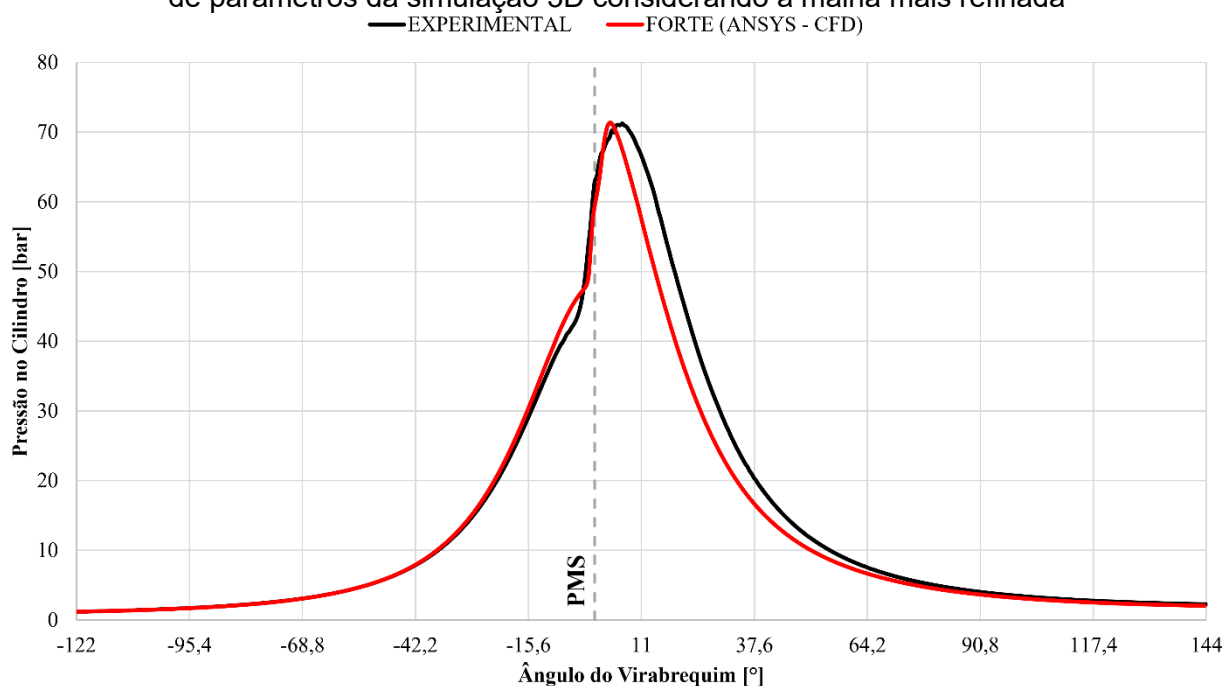
5.2.2 Resultados para a Validação do Modelo 3D no Forte

Além dos dados considerados anteriormente na análise 0-D realizada no Chemkin-Pro, também foram considerados alguns parâmetros próprios da análise 3D realizada no Forte, principalmente em relação à modelagem do spray do combustível primário, considerações que foram discutidas anteriormente na Seção 4.4.4, para tal considerou-se a malha mais refinada definida na Tabela 9. Resumidamente, considerou-se 3500 parcelas de gotículas do *spray*, com distribuição uniforme e perfil de velocidade de injeção quadrado.

As simulações CFD no modelo 3D foram feitas no *software* Forte, presente na versão 2022 R1 do ANSYS, e em um computador com sistema operacional Windows 10 de 64 bits, com memória RAM de 16,0 GB e processador AMD Ryzen 3 5300U with Radeon Graphics 2.60 GHz.

A validação da simulação 3D com o resultado experimental, é apresentada na Figura 44, comparando-se as curvas de pressão no cilindro obtidas pelo Forte (análise CFD no ANSYS) e experimentalmente.

Figura 44 – Validação da curva de pressão no cilindro CFD para o diesel puro com ajustes de parâmetros da simulação 3D considerando a malha mais refinada



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Observando a Figura 44, nota-se que há uma boa concordância entre as curvas experimental e CFD, principalmente na parte anterior ao pico de pressão no cilindro. Na parte posterior há uma discordância entre as curvas, todavia o mesmo padrão de discordância foi observado na análise 0-D, de forma que essa diferença

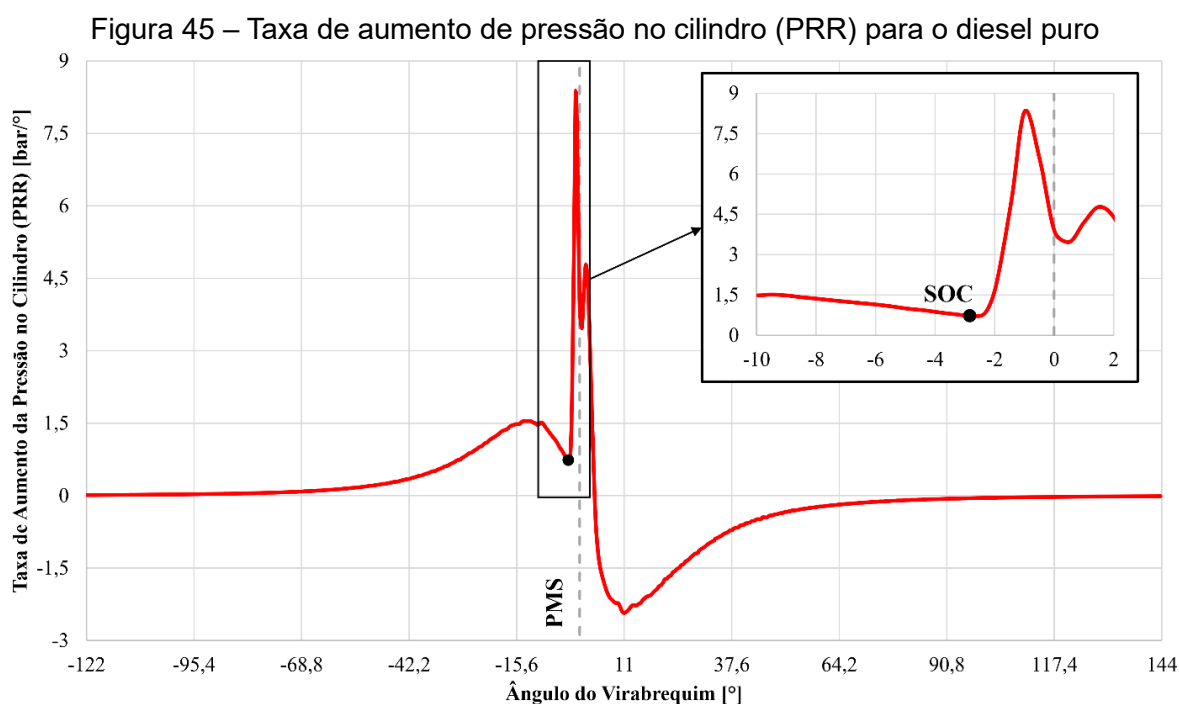
provavelmente está relacionada ao modelo cinético considerado. Observa-se ainda que a curva obtida nas simulações computacionais apresenta um maior atraso na ignição que a curva experimental e seu valor máximo ocorre em uma posição anterior à observada experimentalmente. Todavia, o valor do pico de pressão no cilindro obtido experimentalmente foi igual a 71,218 bar, enquanto que o obtido pelas simulações no Forte foi igual a 71,334 bar, representando assim um erro percentual de 0,163% entre si. O cálculo desse erro percentual foi feito pela equação a seguir.

$$\text{ERRO}\% = 100 \cdot \left(\frac{X_{sim} - X_{exper}}{X_{exper}} \right) \quad (100)$$

onde X_{sim} e X_{exper} referem-se aos valores obtidos pela simulação computacional e pelo experimento, respectivamente.

Diferenças similares entre curvas experimental e computacional são amplamente encontradas na literatura, haja visto que não há um modelo ideal e perfeito para as simulações computacionais de motores de combustão interna.

A partir da curva de pressão no cilindro, pode-se obter a curva para a taxa de aumento de pressão (PRR – *Pressure Rise Rate*, do inglês). Essa curva é esboçada na Figura 45 e foi obtida através da aproximação numérica da derivada primeira da pressão no cilindro pelo ângulo do virabrequim.



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Nota-se que as regiões de maior importância (que há maiores variações) para a taxa de variação da pressão no cilindro está no intervalo $-60^\circ \leq \text{CAD} \leq 60^\circ$. Na região anterior ao PMS observa-se um leve e lento crescimento em PRR e, em seguida, um decrescimento até atingir um ponto de mínimo (de valor positivo) que, segundo Xin (2013), é de onde pode-se estimar o início da combustão (SOC – *Start Of Combustion*, do inglês), estimado em $\text{SOC} \cong -2,83^\circ$, havendo em seguida um rápido aumento até atingir o seu valor máximo, de $8,332 \text{ bar}/^\circ$, no caso. Em seguida, observa-se um grande decréscimo em seu valor em um curto intervalo de tempo, atingindo um segundo ponto de mínimo (de valor negativo) e, por fim, nota-se um tênue aumento em seu valor chegando a valores próximos de zero. As regiões onde PRR possuem variações muito pequenas, próximas a zero, indicam um equilíbrio entre a pressão dentro da câmara de combustão e as pressões das válvulas de admissão e exaustão. Comportamento similar para a curva da taxa de aumento de pressão em função do ângulo do virabrequim também é observado na literatura, como em Wei *et al.* (2012), Tutak e Jamrozik (2013) e Rimkus, Stravinskas e Matijošius (2020), sendo que estes dois últimos comparam a curva de PRR considerando diferentes combustíveis e/ou misturas de combustíveis.

As Figuras 46 e 47 apresentam as curvas para as variações da taxa de liberação de calor (AHRR – *Apparent Heat Release Rate*, do inglês) e do calor acumulado liberado (AAHR – *Accumulated Apparent Heat Release*, do inglês), obtidas a partir do diagrama $p-v$ com γ constante, em função do ângulo do virabrequim, respectivamente.

Analizando as Figuras 46 e 47, observa-se que há um aumento súbito tanto na taxa de liberação de calor, quanto no seu acumulado, em um ponto próximo ao PMS. Esse aumento súbito ocorre logo após o início da combustão, como pode ser observado no trecho ampliado da Figura 46.

Segundo Xin (2013) e Heywood (2018), o SOC é também estimado a partir das curvas relativas à liberação de calor, sendo o ponto onde a taxa de liberação de calor (AHRR) possui valor nulo, ou seja, quando cruza o eixo y , e/ou onde o calor liberado acumulado possui um ponto de mínimo, após a injeção de combustível. Dessas análises, tem-se da AHRR que $\text{SOC} \cong -3,736^\circ$, pois das simulações foram obtidos: $\text{CAD} = -3,93728^\circ \rightarrow \text{AHRR} = -0,0854 \text{ J}/^\circ$ e $\text{CAD} = -3,4417^\circ \rightarrow \text{AHRR} = 0,12441 \text{ J}/^\circ$ e o ponto de mínimo na curva do calor liberado acumulado, vide Figura 47, $\text{CAD} = -3,93728^\circ \rightarrow \text{AAHR} = -24,6317 \text{ J}$. Nota-se que a divergência entre ambos os

valores estimados para SOC a partir das curvas de liberação de calor, $CAD = -3,736^\circ$ de AHRR e $CAD = -3,937^\circ$ de AAHR, se deve à resolução do passo de tempo e, consequentemente, do passo de ângulo do virabrequim, gerado na malha temporal automática do Forte, no entanto os valores são bem próximos e concordam entre si.

Figura 46 – Taxa de liberação de calor e estimativa do início da combustão do diesel puro

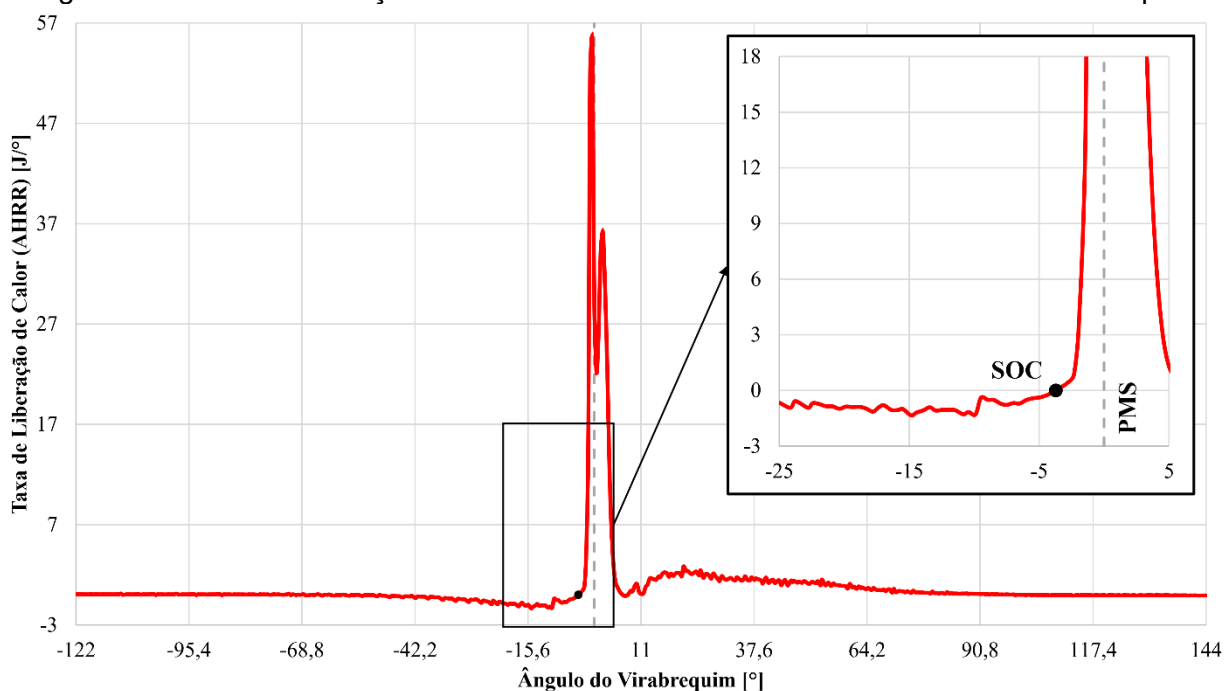
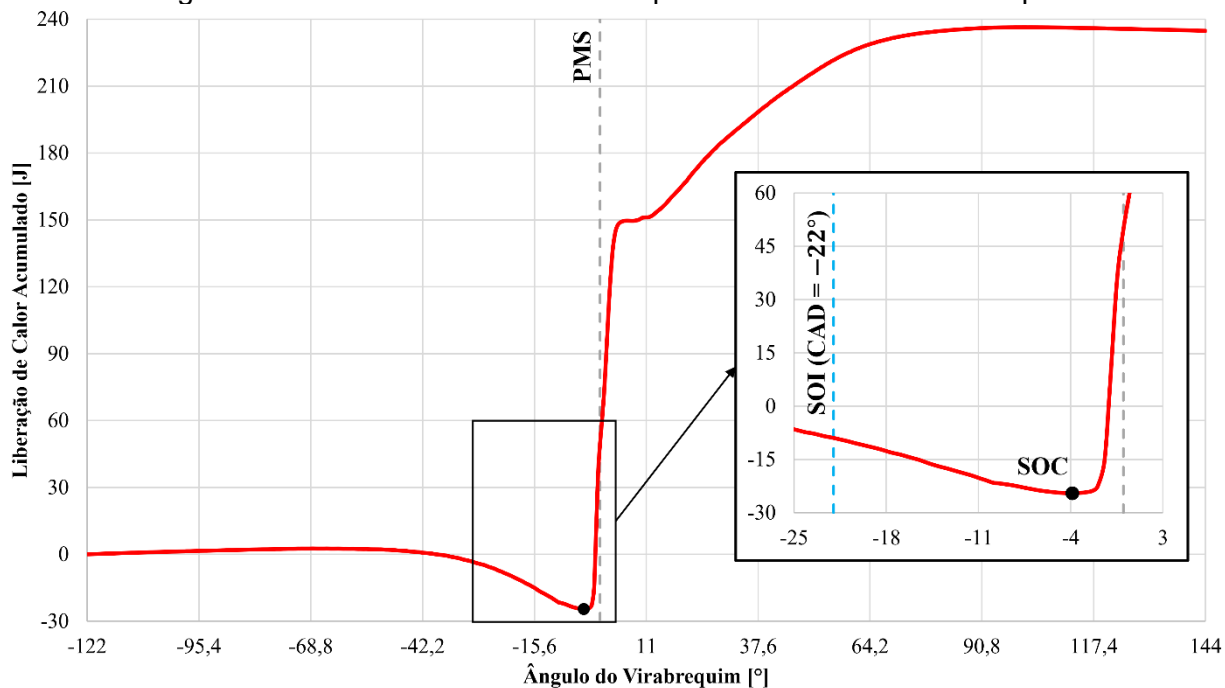


Figura 47 – Calor liberado acumulado para a combustão do diesel puro



Ainda da Figura 46, nota-se que há um alto pico na taxa de liberação de calor logo após o início da combustão, indicando uma fase pré-misturada, ou de combustão rápida, onde a energia química liberada pelo combustível misturado com o ar é rápida em um curto intervalo de tempo, resultando na alta taxa de liberação de calor proveniente da combustão da mistura rica em combustível dentro de cada spray (HEYWOOD, 2018). Esta fase também é responsável pelo pico na pressão no cilindro, como pode ser observado comparando-se as Figuras 44 e 46. Posterior a essa fase, a taxa de liberação de calor sofre uma redução brusca e a combustão nessa etapa é controlada pela taxa na qual a mistura ar-combustível se torna disponível para queima (HEYWOOD, 2018), essa fase é a mais duradoura e onde haverá uma redução na pressão no cilindro.

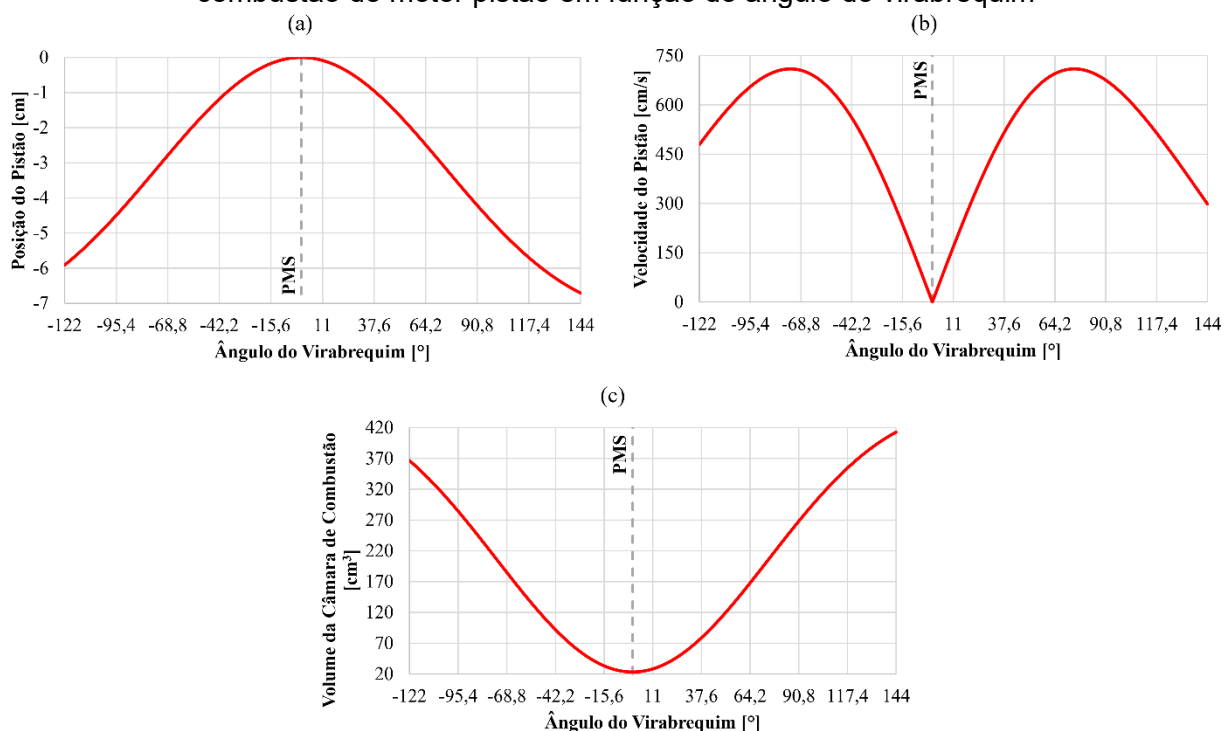
A rápida descida no acúmulo de calor liberado após o início da injeção do diesel, como pode ser observado no zoom da Figura 47, deve-se à transferência de calor para o combustível líquido a fim de aquecê-lo e vaporiza-lo para dar-se início à combustão (HEYWOOD, 2018). Além disso, nota-se também que a aproximadamente 50° antes da abertura da válvula de exaustão, o calor liberado acumulado apresenta um perfil quase constante.

As Figuras 48 (a), (b) e (c) mostram, nessa ordem: a variação da posição do pistão, em relação ao seu ponto morto superior, tomado como referência $z = 0$; a variação da velocidade do pistão e a variação do volume interno da câmara de combustão, em função do ângulo do virabrequim.

A Figura 48 (a) mostra que a posição de referência do pistão é no seu ponto morto superior (PMS), onde a sua velocidade é nula, vide Figura 48 (b), e onde também o volume da câmara de combustão possui seu valor mínimo, vide Figura 48 (c), que é igual a 23,334 cm³. Além disso, nota-se que o volume deslocado na câmara de combustão é igual a 418,334 cm³, correspondendo assim à razão de compressão igual a 19, vide Eq. (3).

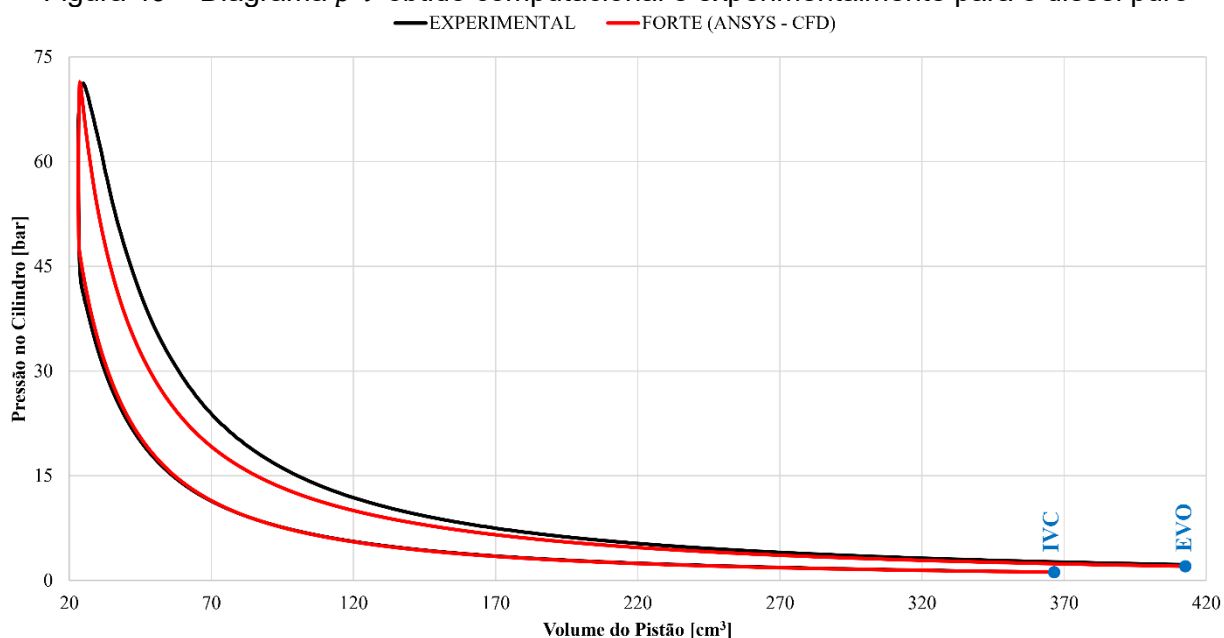
A partir dos valores encontrados nas simulações CFD para o volume da câmara de combustão e para a pressão média no cilindro, traça-se o diagrama $p-v$ para o motor, que é apresentado na Figura 49.

Figura 48 – Variação da posição e da velocidade do pistão e do volume da câmara de combustão do motor pistão em função do ângulo do virabrequim



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 49 – Diagrama $p-v$ obtido computacional e experimentalmente para o diesel puro



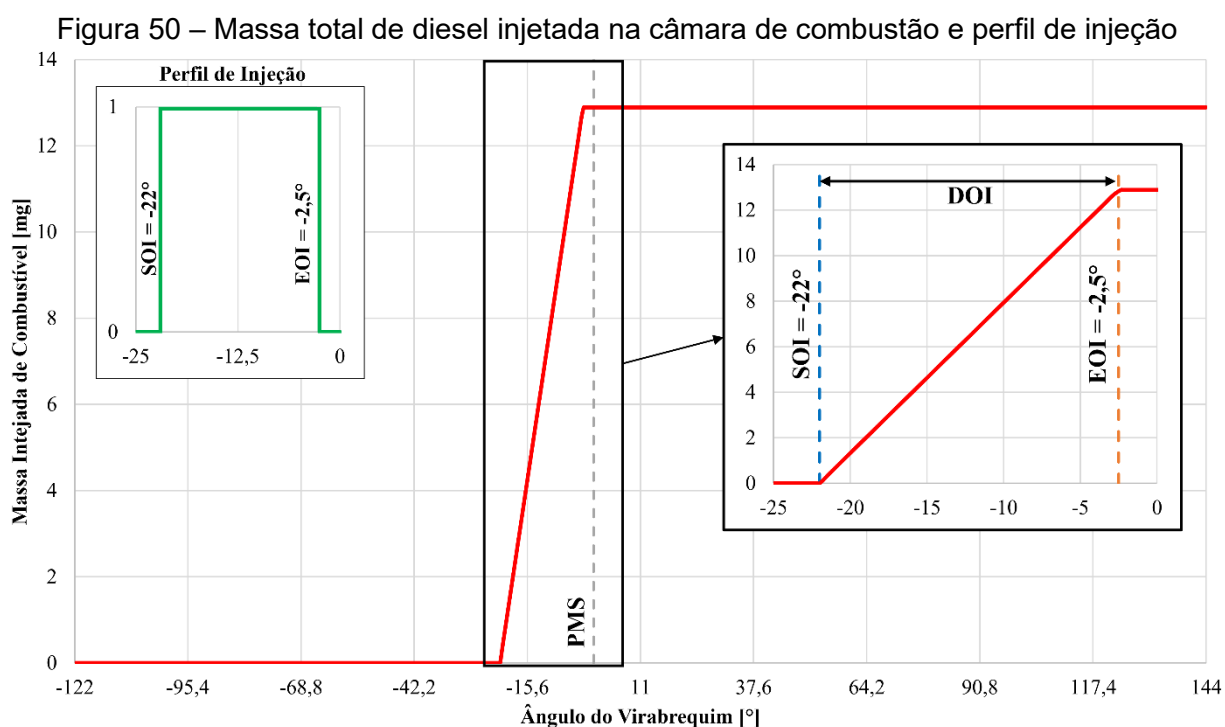
Legenda: IVC – ponto de fechamento da válvula de admissão (*Inlet Valve Closing*); EVO – ponto de abertura da válvula de exaustão (*Exhaust Valve Opening*).

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Note que entre a curva $p-v$ obtida na simulação CFD, vide Figura 49, e a apresentada na Figura 11 há uma concordância, podendo-se observar que o ciclo de

motor de compressão simulado apresenta uma região relativa à compressão, que se inicia após o fechamento da válvula de admissão (ponto IVC no gráfico da Figura 49) e de onde a simulação se inicia, indo até o ponto morto superior, onde há um aumento da pressão devido à adição de calor em um processo isocórico (volume constante), seguido por uma região de expansão que estende-se até a abertura da válvula de exaustão (ponto EVO no gráfico da Figura 49), onde a simulação CFD é finalizada. Observa-se ainda uma concordância entre as curvas $p-v$ experimental e computacional, assim como apresentado na Figura 44 para a curva de pressão.

A injeção de combustível e seu respectivo avanço ao longo do movimento do pistão são esboçados na Figura 50, que representa a quantidade de combustível acumulado, em massa, no cilindro a cada ciclo. A quantidade total de combustível injetado foi obtida experimentalmente e encontra-se na Tabela 11.



Legenda: As siglas referem-se à: SOI – início da injeção (*Start Of Injection*); EOI – fim da injeção (*End Of Injection*) e DOI – duração da injeção (*Duration of Injection*).

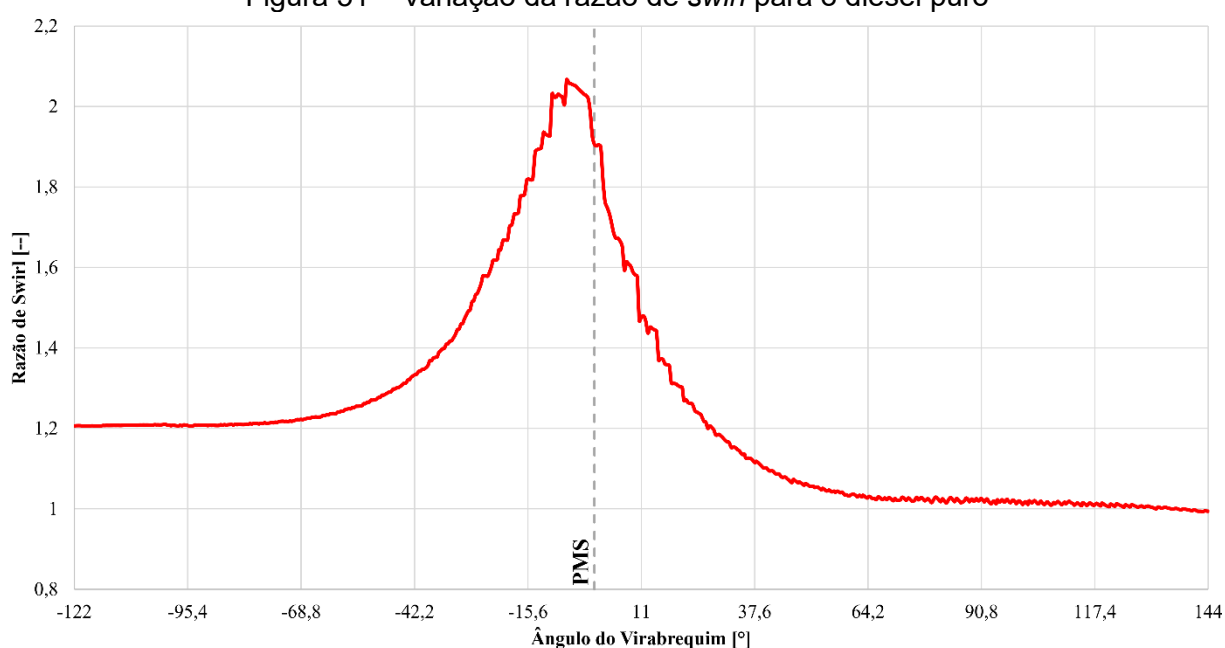
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A partir da Figura 50 percebe-se que a variação da massa de combustível injetada a cada ciclo é caracterizada pelo perfil da velocidade de injeção (apresentado no canto superior esquerdo da figura) que foi considerado como quadrado. Assim, o comportamento para a massa acumulada de combustível injetado é linear, tendo como ponto inicial para a inclinação dessa reta, o ângulo de início de injeção, ou seja,

$SOI = -22^\circ$, e seu ponto final em $EOI = -2,5^\circ$, mantendo-se constante posteriormente, pois a curva representa a massa de combustível injetada acumulada no ciclo. Esse ponto final é caracterizado pelo início da injeção somado à sua duração, $DOI = 19,5^\circ$, como indicado no trecho ampliado no gráfico da Figura 50.

Os efeitos da turbulência no movimento dos gases no interior do cilindro são caracterizados pela razão de *swirl*, amplamente utilizado em motores Diesel. A Figura 51 apresenta a variação dessa razão em função do ângulo do virabrequim, tendo sido considerada como razão inicial o valor padrão sugerido pelo Forte: 1,2.

Figura 51 – Variação da razão de *swirl* para o diesel puro



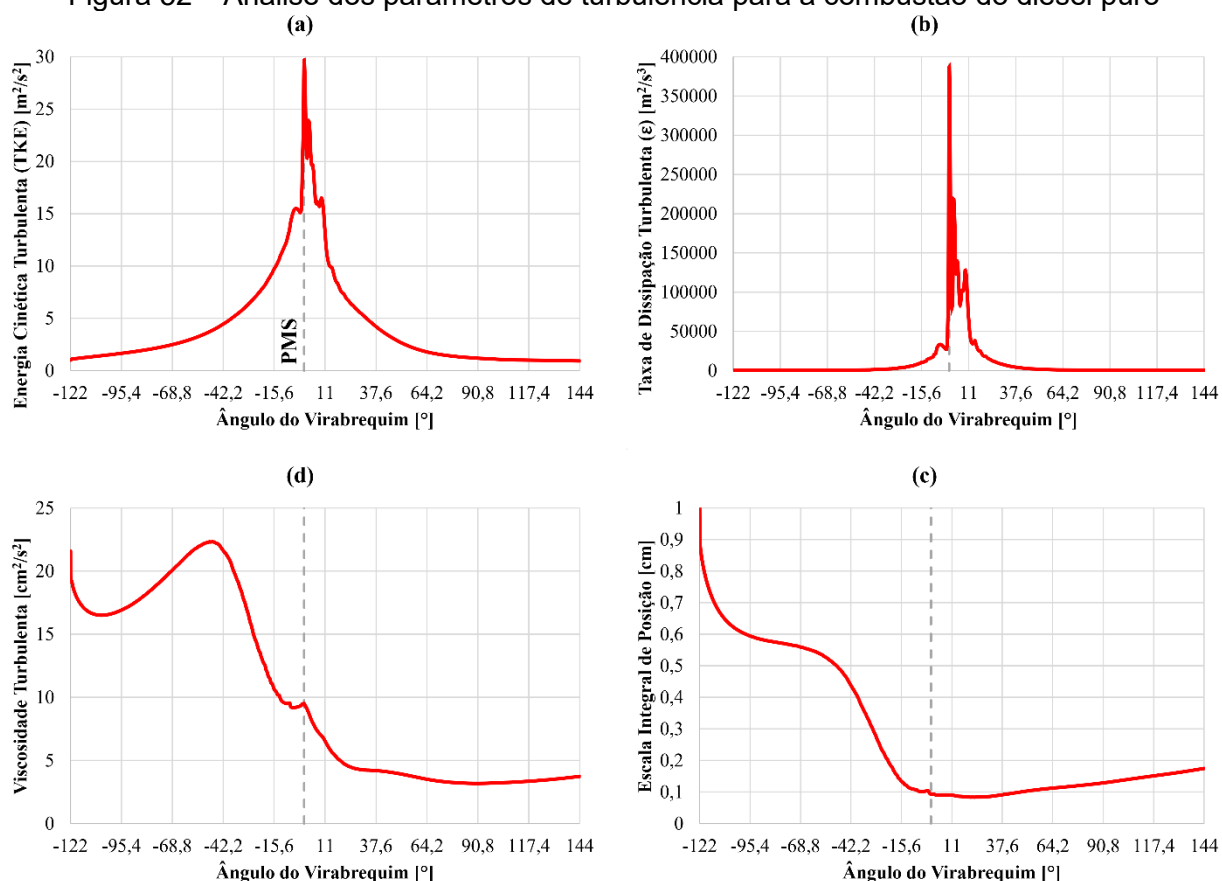
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Analisando a Figura 51, pode-se notar que a razão de *swirl* eleva-se conforme o movimento do pistão tende ao ponto morto superior (PMS), haja visto que quanto mais se encaminha para o PMS, maior será o movimento turbulento dos gases no interior da câmara de combustão, sendo inclusive a geometria do pistão projetada pra tal finalidade. De forma inversa, na região posterior ao PMS, a razão de *swirl* decresce, indicando que há uma redução no movimento de turbulência dos gases presentes na câmara de combustão. Esse comportamento se dá devido à expansão dos gases na combustão, o que aumenta o movimento de *swirl* e é onde, nas proximidades do início da combustão, que está o seu valor máximo (KARUPPA RAJ e MANIMARAN 2012; PULKRABEK, 2013).

Comportamentos similares para a razão de *swirl* em função do ângulo do virabrequim foram também observados por Prasad *et al.* (2011), Ganji *et al.* (2018), De Robbio *et al.* (2021) e Millo *et al.* (2022).

Uma análise gráfica mais completa do movimento turbulento e suas características é apresentada na Figura 52, onde é possível observar o comportamento das principais variáveis da modelagem de turbulência em função do ângulo do virabrequim: a energética cinética turbulenta (TKE), definida na Eq. (51), e sua taxa de dissipação (ε), definida na Eq. (53), bem como a viscosidade cinemática turbulenta (ν_T), definida na Eq. (52) e a escala integral de comprimento (L), presente na Eq. (53), que correlaciona a como no processo de análise de turbulência haverá uma relação com parâmetros e/ou posição anteriores e como este é influenciado.

Figura 52 – Análise dos parâmetros de turbulência para a combustão do diesel puro



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Na análise dos parâmetros de turbulência, apresentados na Figura 52, foram inicializadas no Forte, nas condições iniciais, a energia cinética turbulenta (TKE – *Turbulent Kinetic Energy*, do inglês) como $TKE = 1 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e a escala integral de comprimento (L – *Integral Length Scale*, do inglês) como $L = 1 \text{ cm}$.

A partir das Figuras 52 (a) e (b) nota-se que há um crescimento considerável da energia cinética turbulenta e, conseqüentemente, da sua taxa de dissipação nas proximidades do PMS, indicando que quanto mais próximo desse ponto, ou seja, quanto mais comprimidos estão os gases dentro da câmara de combustão, maior será o movimento turbulento e, por conseguinte, maiores serão as velocidades dos gases nessa região, coincidindo seu pico com o início da combustão, região que há aumento do movimento de *swirl*, como explicado anteriormente.

Para a viscosidade turbulenta não há um comportamento regular, mas pode-se notar que há uma redução significativa de seu valor ao se comparar as condições inicial (EVO – CAD = -122°) e final (IVC – CAD = 144°) da simulação, sendo que esse decréscimo ocorre de forma mais abrupta até as regiões próximas ao início da ignição e do ponto morto superior.

De forma análoga, nota-se que há uma redução significativa na escala de comprimento integral ao longo do ângulo do virabrequim até o PMS, seguido por um tênue aumento, porém não sendo este tão significativo. No ciclo de combustão analisado, houve uma redução de aproximadamente 80% na escala de comprimento considerada inicialmente.

Nota-se ainda que o aumento do movimento turbulento na câmara de combustão contribuiu para o aumento das taxas de transferência de calor (PULKRABEK, 2013), como se observa nas Figuras 46, 47 e 52 com elevações em seus valores nas mesmas regiões.

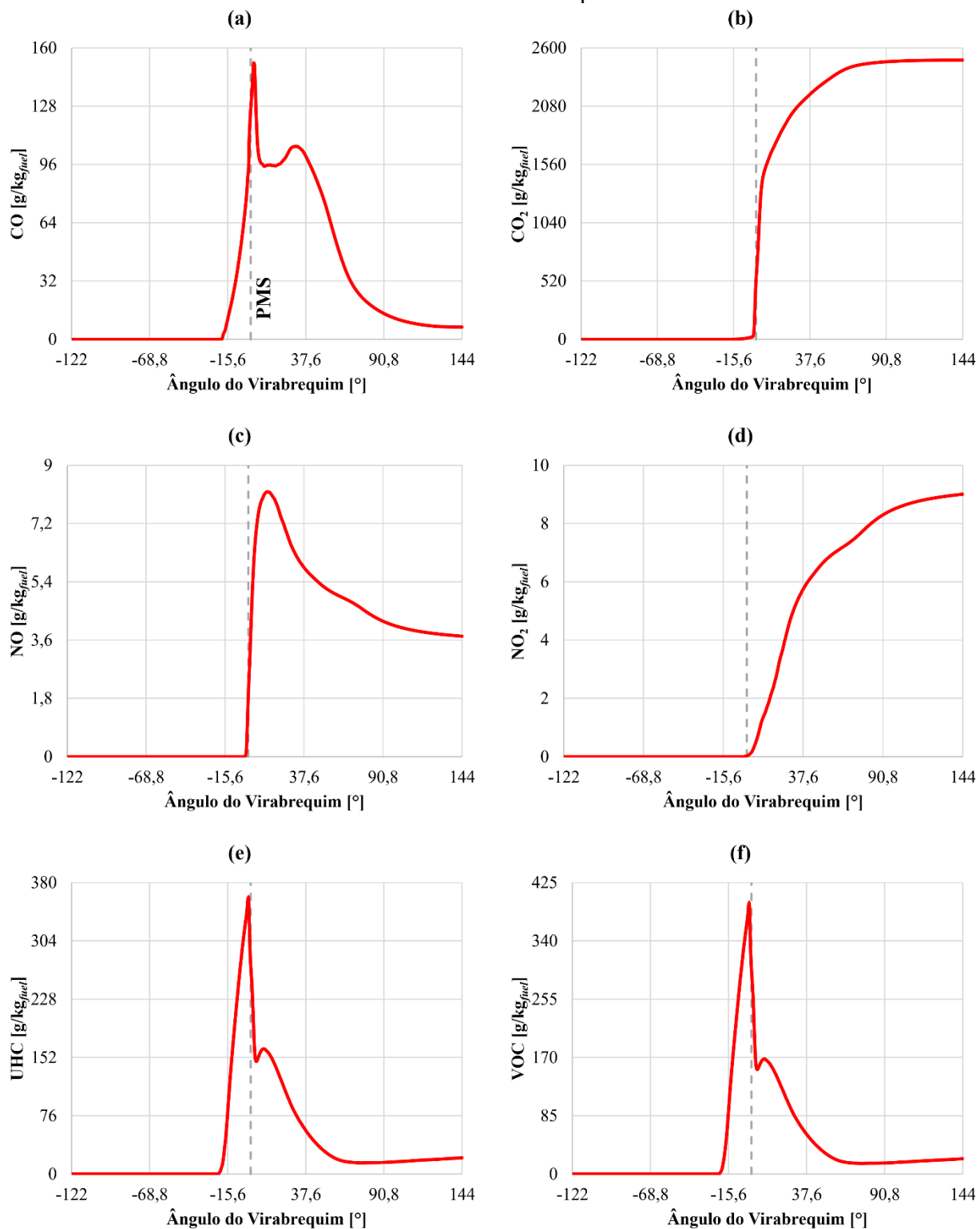
Segundo a literatura de motores de combustão interna, a alta turbulência é benéfica para uma operação eficiente do motor, contribuindo para a mistura ar-combustível, os processos de evaporação do combustível, de transferência de calor e da combustão em si (PULKRABEK, 2013; HEYWOOD, 2018).

A variação das emissões dos principais poluentes: CO (Monóxido de Carbono), CO₂ (Dióxido de Carbono), NO (Monóxido de Nitrogênio), NO₂ (Dióxido de Nitrogênio), NO_x (Óxidos de Nitrogênio), Fuligem (*Soot*, do inglês), UHC (Hidrocarbonetos Não-Queimados, do inglês *Unburnt Hydrocarbon*), VOC (Componentes Orgânicos Voláteis, do inglês *Volatile Organic Compound*), em função do ângulo do virabrequim são apresentadas na Figura 53 em g de emissões por kg de combustível (g/kg_{fuel}).

É possível observar, analisando a Figura 53, que as emissões de CO, UHC e VOC começam a aumentar a partir de uma região próxima ao início da injeção do diesel na câmara de combustão, enquanto que para o CO₂, NO e NO₂ esse aumento

torna-se considerável na região próxima do início da combustão. Nota-se ainda que as emissões de hidrocarbonetos não queimados e dos componentes voláteis possuem perfil similar.

Figura 53 – Variação das emissões de poluentes em função do ângulo do virabrequim para a combustão do diesel puro



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

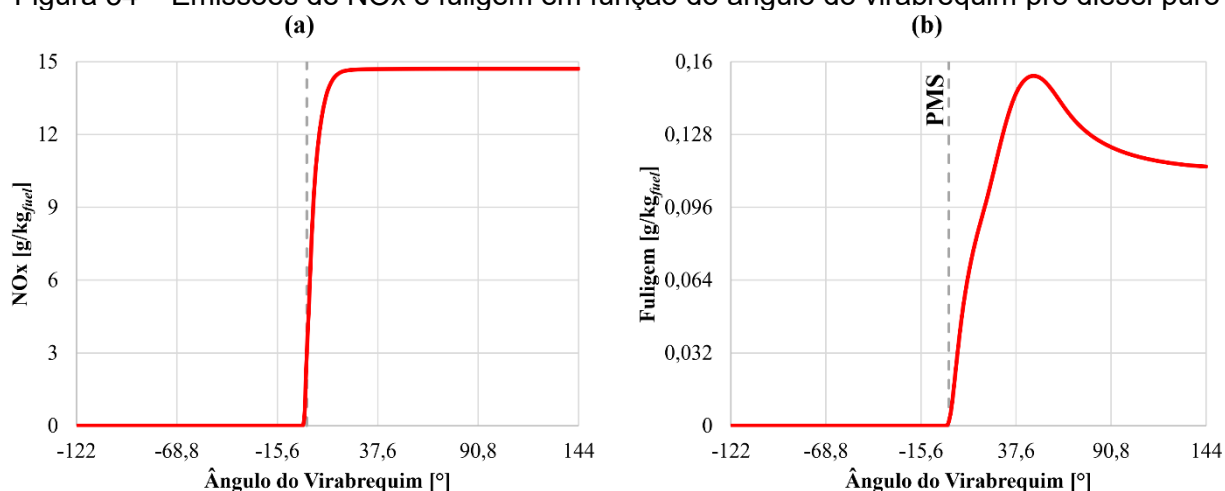
Como já esperado, dentre todos os poluentes, o que possui maior nível de emissões é o dióxido de carbono, o que está relacionado com a reação de combustão em si, haja visto que do próprio balanço químico este é o componente com maior fração molar dentre os produtos, tendo o comportamento da curva similar ao descrito em Zhang *et al.* (2015).

Além disso, os poluentes com duas moléculas de oxigênio em sua composição apresentam, durante todo ciclo de combustão, comportamento crescente até atingir quase um estado de regime permanente, o que é mais visível para o CO₂. Por sua vez, os demais poluentes alcançam um valor máximo de emissões e, em seguida decrescem seu valor, seja de uma forma mais abrupta, para os casos de CO, UHC e VOC, seja de forma mais suave, como para o NO. Nota-se também que as emissões de UHC e VOC seguem o mesmo padrão de curva, haja visto que eles estão relacionados entre si e indicam uma combustão incompleta. Um comportamento similar para as emissões de NO em função do ângulo de virabrequim foi observado por Hiroyasu e Kadota (1976) e por Mansouri e Bakhshan (2001) e por Zhang *et al.* (2015) para as emissões de CO, CO₂, fuligem e NO_x, que variam dependendo da taxa e da duração de injeção de combustível. Mondo *et al.* (2022) apresenta curvas com tendências similares às encontradas nesse trabalho para as emissões de CO e UHC.

De forma geral, as emissões de NO e NO₂ podem ser somadas contabilizando assim apenas um único componente, o NO_x, que é mais comum em medições experimentais. Esse nível de emissão é apresentado na Figura 54 (a), juntamente com os níveis de emissões de fuligem, Figura 54 (b), que são as curvas normalmente encontradas na literatura para variação das emissões em função do ângulo do virabrequim.

A Figura 54 (a) mostra que os níveis de NO_x apresentam um aumento súbito em seu valor na região próxima ao início da ignição, atingindo seu valor máximo em um curto intervalo de tempo (pequena variação no ângulo do virabrequim). Já as emissões de fuligem demoram um maior intervalo de tempo para atingir seu valor máximo e, em seguida, decresce seu valor de forma tênue. Ressalta-se que a predição de fuligem foi feita através do modelo de duas etapas, sendo considerados seus parâmetros de modelagem conforme padrões presentes no Forte, que também sugere uma análise pelo método dos momentos, como discutido na Seção 4.4.5.

Figura 54 – Emissões de NOx e fuligem em função do ângulo do virabrequim pro diesel puro

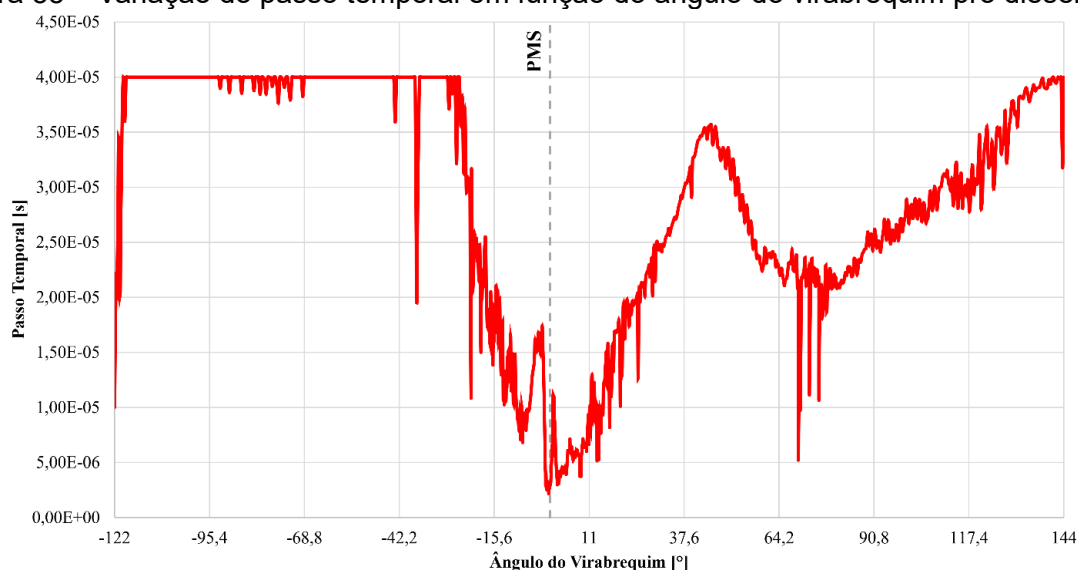


Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Comportamentos similares para as curvas de emissões de NOx e fuligem são descritos em diversos trabalhos na literatura, como em: Karuppa Raj e Manimaran (2012), Raeie, Emami e Sadaghiyan (2014); Chowdary *et al.* (2016); Ashkezari *et al.* (2017); Ganji *et al.* (2017), que obtiveram resultados através de análises CFD com diversos *softwares*.

Considerando a discussão realizada na Seção 4.3, que o Forte utiliza uma malha adaptativa temporal, a Figura 55 apresenta a variação do passo temporal em função do ângulo do virabrequim para esse caso analisado. Ressalta-se que foi definido um passo temporal de início da simulação, igual a $1,0 \cdot 10^{-5}$ s, e estipulado um passo temporal máximo, igual a $4,0 \cdot 10^{-5}$ s, que alcançado em algumas partes da simulação, como pode ser observado na Figura 55.

Figura 55 – Variação do passo temporal em função do ângulo do virabrequim pro diesel puro



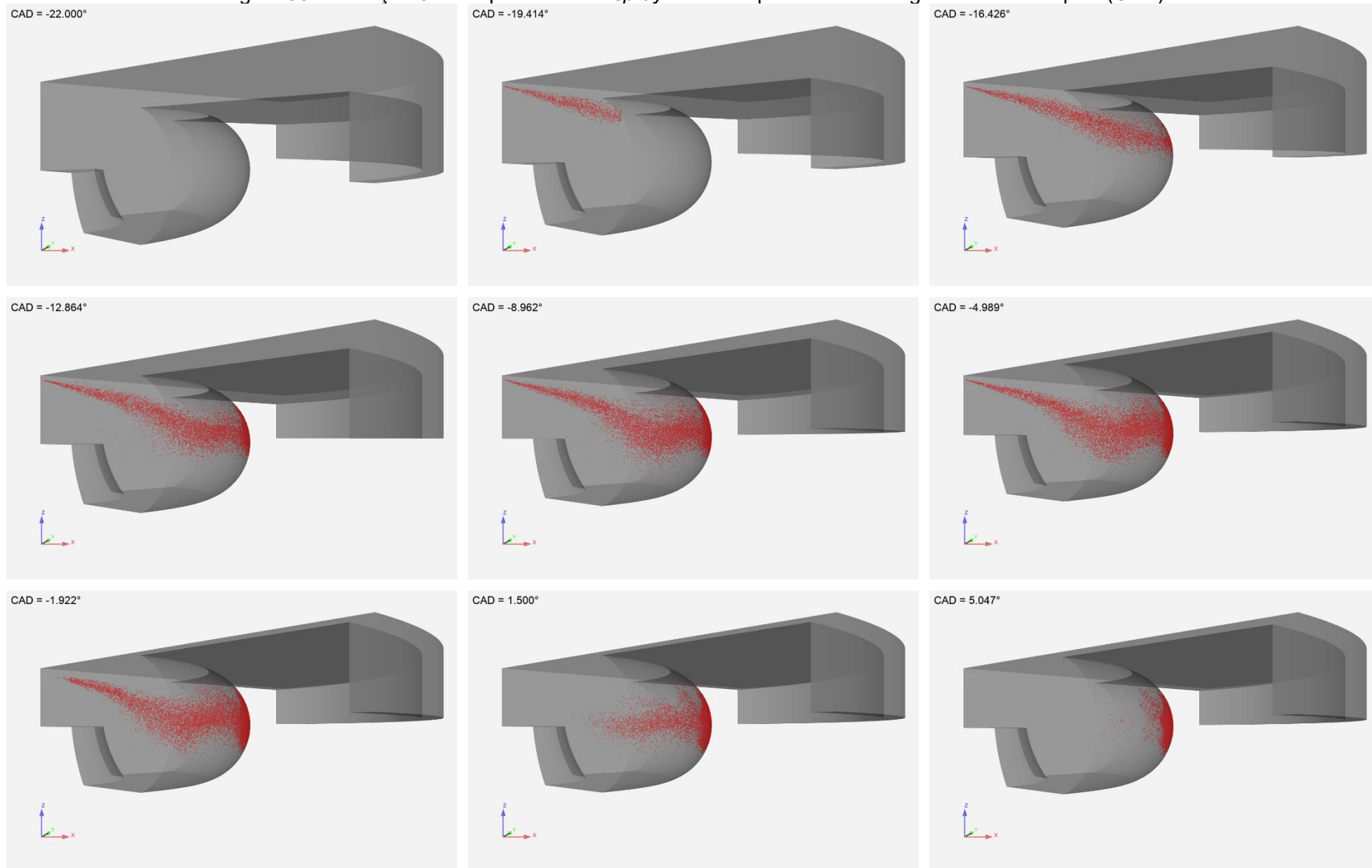
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Observa-se que os menores passos temporais estão na região próxima ao ponto morto superior e, ainda, após o início da injeção de combustível, o que já era de se esperar, haja visto que nesses momentos há um maior custo computacional devido à uma maior precisão nas soluções das equações de conservação que descrevem o problema.

A representação espacial da injeção de combustível e os campos tridimensionais para a magnitude da velocidade, a temperatura e das frações molares de CO, CO₂, NO e NO₂ são apresentados nas Figuras 56 a 63, considerando diferentes ângulos do virabrequim (CAD). A fim de melhor visualização dos efeitos das variações de cada quantidade, foi considerado um único intervalo, entre máximo e mínimo, para cada quantidade, independente do ângulo do virabrequim (CAD).

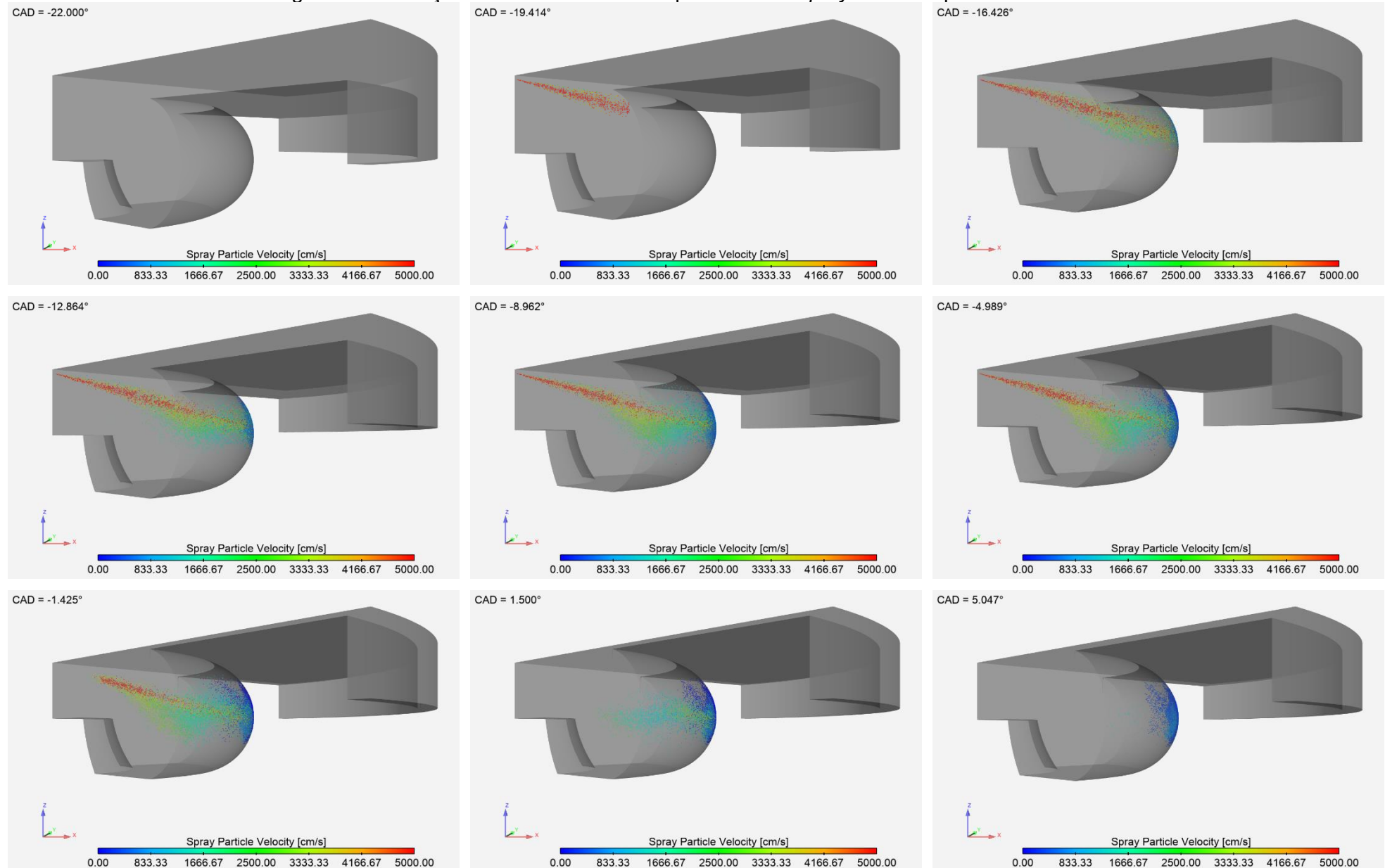
A Figura 56 apresenta a variação das gotículas do *spray* de combustível no interior da câmara de combustão, de onde se observa que a quantidade/densidade de partículas se torna maior conforme se avança no tempo de injeção de combustível, o que é observado também pela Figura 50. Além disso, nota-se que uma parte das partículas do *spray* de combustível tendem a permanecer “grudadas” na parede do pistão, esse fenômeno está relacionado com a qualidade e/ou eficiência do processo de combustão e, também, com a característica geométrica do pistão. Representações espaciais similares para o *spray* de diesel são encontradas, por exemplo, em Boot *et al.* (2010), Karuppa Raj e Manimaran (2012), Lakshminarayanan e Aghav (2012) e Merker, *et al.* (2012).

Já na Figura 57, é apresentada como a velocidade do *spray* varia espacialmente na câmara de combustão. Nota-se que os seus maiores valores, nas cores mais avermelhadas (chegando a valores na ordem de 50 m/s), estão próximos à saída do injetor e na região central da direção do jato de combustível. De modo oposto, os menores valores, representados nas cores mais próximos à azul (vide escala de cores), estão próximas à parede e nas regiões mais distantes da saída do injetor, indicando um movimento de desaceleração do fluido e, de fato, na parede a velocidade é aproximadamente nula (representada na cor azul) indicada pela condição de não deslizamento na parede do pistão, que é descrita pela teoria de contato fluido-superfície na mecânica dos fluidos. Esse comportamento para a velocidade do *spray* do combustível primário, injetado diretamente na câmara de combustão, é também observado por Dempsey *et al.* (2018) e Wang *et al.* (2022).

Figura 56 – Variação 3D das partículas do *spray* do diesel para diversos ângulos do virabrequim (CAD)

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 57 – Variação 3D da velocidade das partículas do *spray* de diesel para diversos CAD

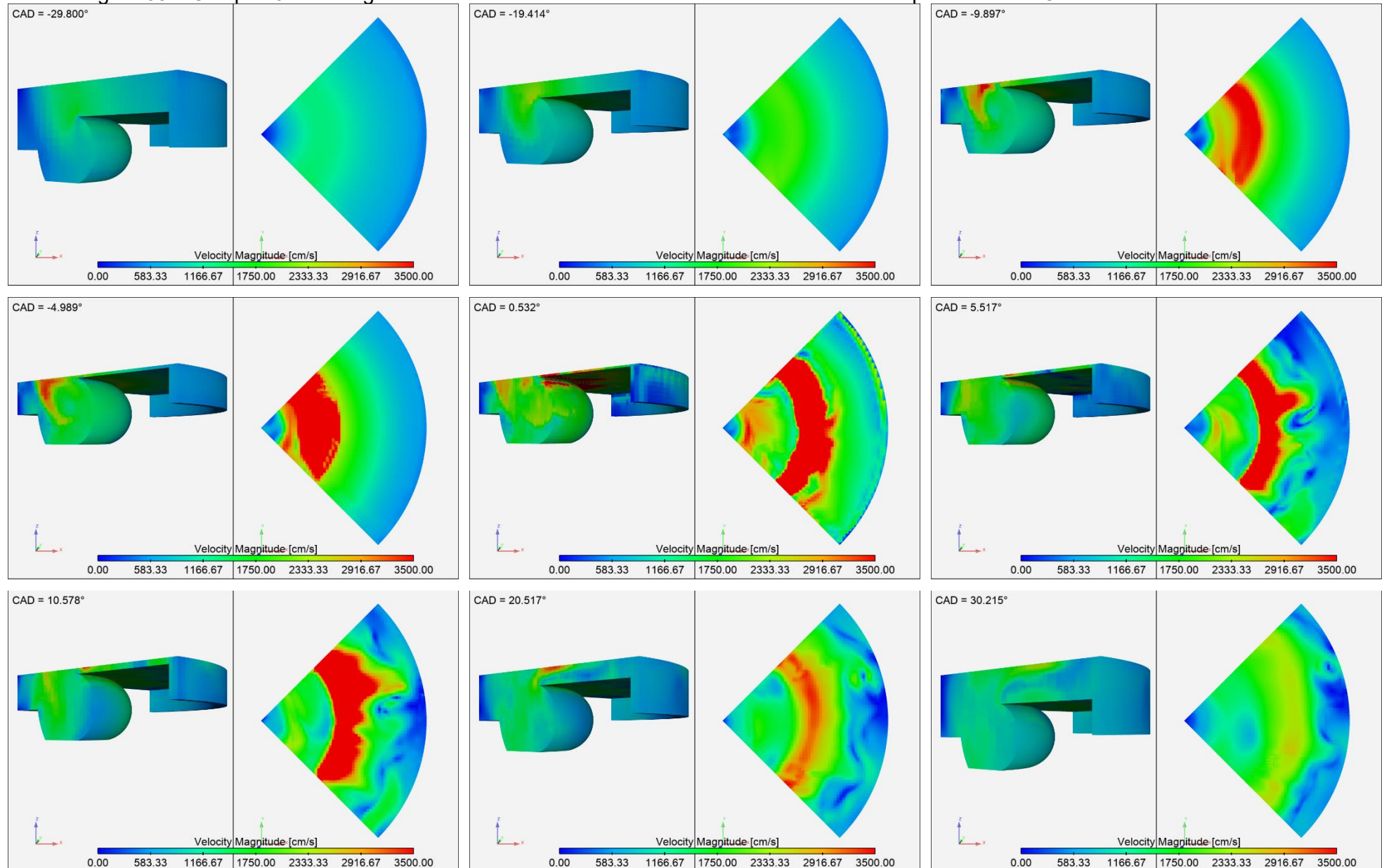


Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Analisando os campos de velocidade apresentados na Figura 58, observa-se que o movimento do fluido é mais homogêneo e com menores velocidades nas regiões anteriores ao ponto motor superior ($CAD = 0^\circ$), tornando-se acelerado conforme o pistão se aproxima do PMS, o que é destacado pela cor avermelhada no campo 3D de velocidade, tendo regiões com valores máximos para a magnitude da velocidade, reduzindo seu valor e tornando-se mais heterogêneo a partir do PMS, como nota-se na vista superior para os ângulos de virabrequim após ao PMS. Nota-se ainda que os maiores valores para a distribuição espacial de velocidade encontram-se na região próxima ao pico de pressão no cilindro, vide Figura 44, indicando novamente que essa região é de maior turbulência, ou seja, com maior energia cinética turbulenta, como claramente observado na Figura 52 (a), implicando em maiores velocidades para o movimento dos fluidos no interior da câmara de combustão.

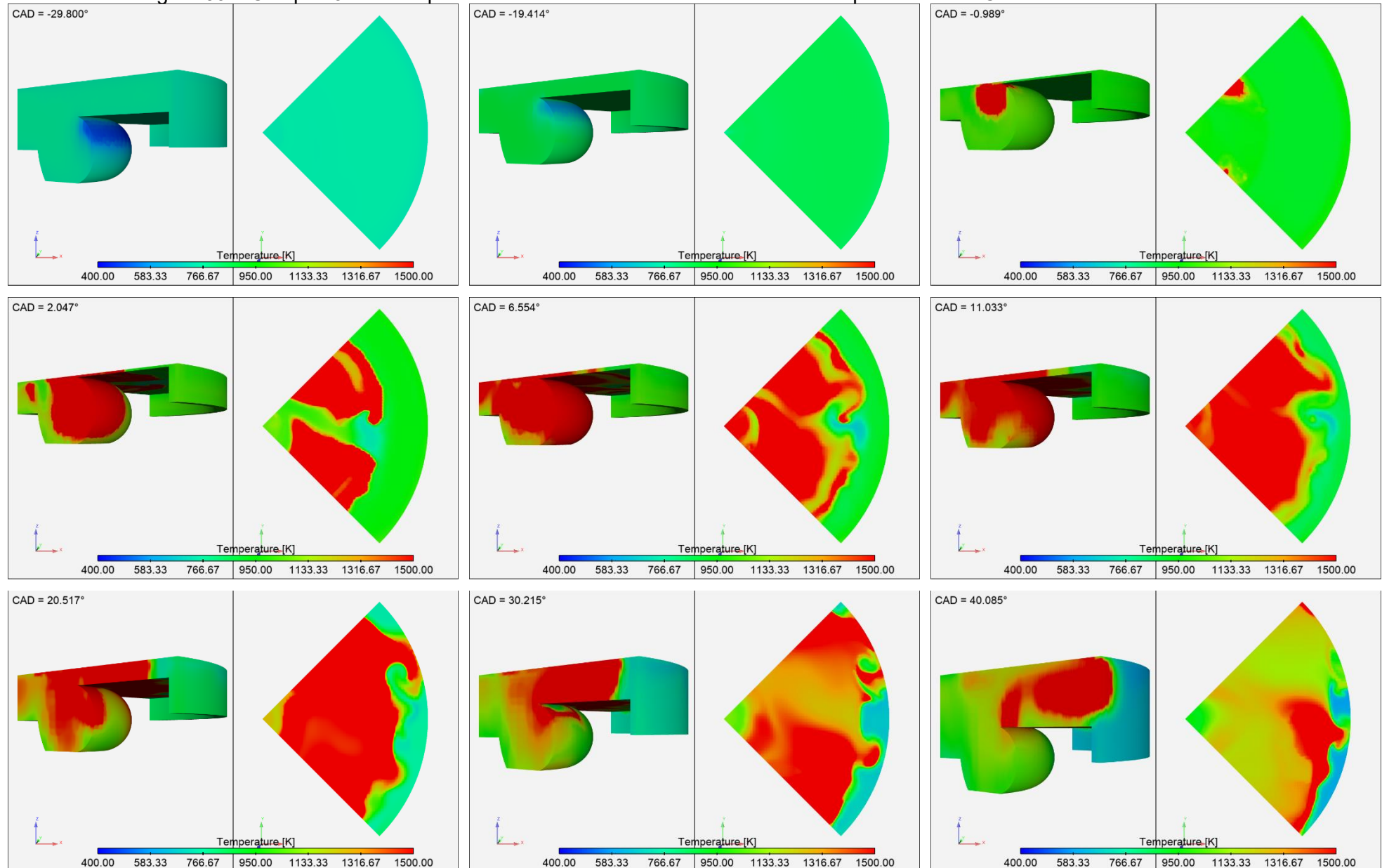
Na Figura 59 são apresentados os campos de temperatura em diferentes CAD, sendo possível observar uma maior homogeneidade na distribuição de temperatura antes do início da combustão e do PMS. Nota-se também que as temperaturas se tornam mais elevadas após o início da combustão, como já era esperado, e apresentam maior homogeneidade em sua distribuição, tendo seu valor reduzido conforme o pistão se afasta do PMS, similar ao que ocorre para a distribuição de velocidade, Figura 58, e para a variação da pressão no cilindro, como é observado na Figura 44, haja visto que pressão e temperatura estão relacionados entre si. Observa-se ainda que os maiores valores para a variação da temperatura encontram-se próximas ao centro do pistão e tendem-se a se movimentar para a parede externa da câmara de combustão conforme avança-se no movimento do pistão.

Figura 58 – Campos 3D da magnitude de velocidade dos fluidos da câmara de combustão para diversos CAD na combustão do diesel



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 59 – Campos 3D de temperatura dos fluidos da câmara de combustão para diversos CAD na combustão do diesel



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

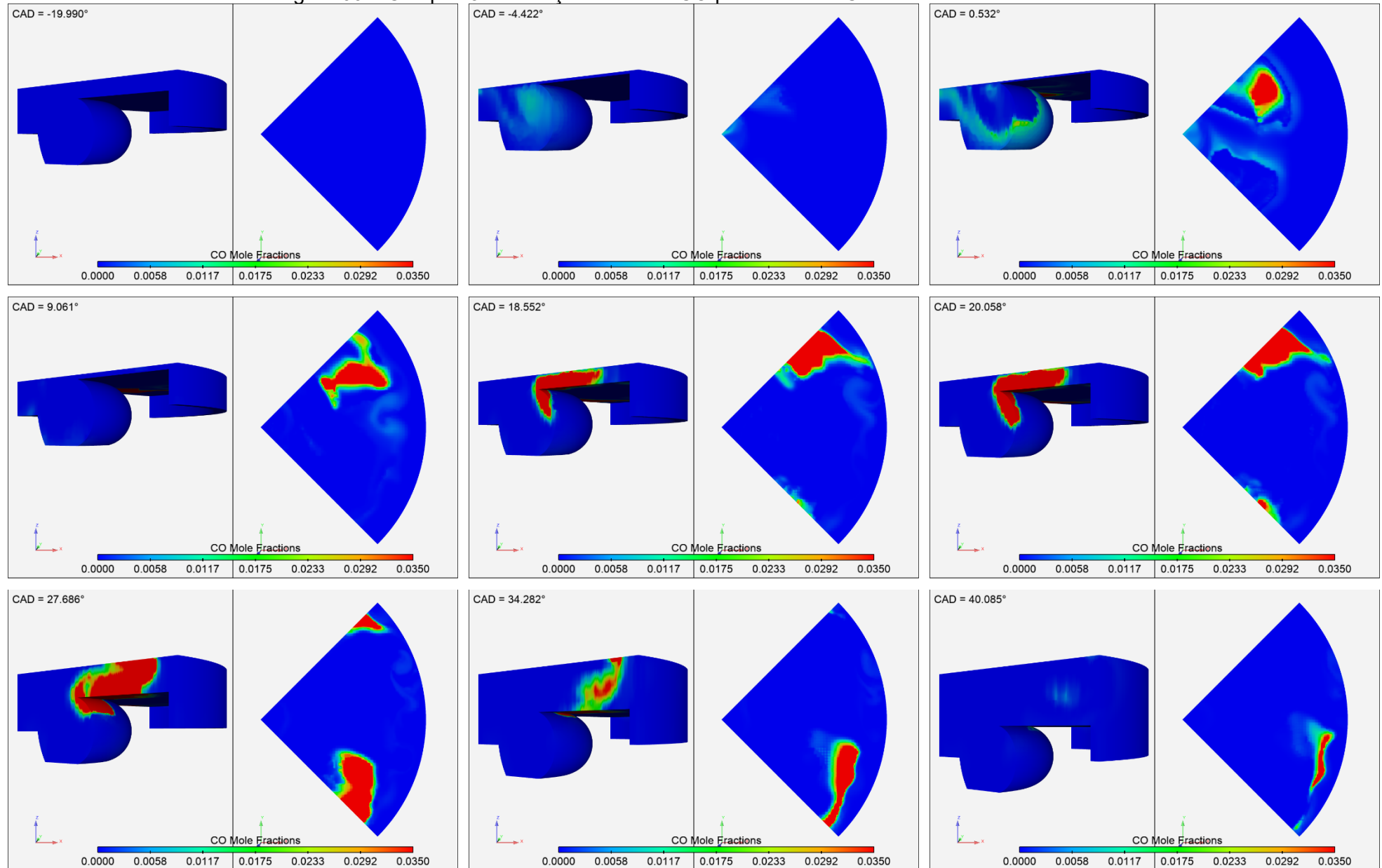
O campo 3D das frações molares de monóxido de carbono, CO, esboçado na Figura 60, mostra que sua variação espacial não é tão expressiva na câmara de combustão e tende a reduzir-se conforme o movimento do pistão é avançado, sendo sua maior frequência de variação de distribuição espacial na região próxima ao ponto morto superior, como também é visível na Figura 53.

A variação espacial das frações molares de dióxido de carbono, CO₂, apresentada na Figura 61, mostra que sua formação é iniciada em torno de CAD = -1° e torna-se maior a partir do PMS, o que já era previsto a partir da curva observada na Figura 53. Além disso, observa-se também que conforme o ângulo do virabrequim aumenta, a distribuição espacial de CO₂ torna-se mais homogênea e tende a aproximar-se da parede externa da câmara de combustão (*liner*), como observado pela cor mais avermelhada nas imagens da Figura 61. Nota-se também que as frações molares de CO₂ são as que possuem maior presença na câmara de combustão e, como mencionado anteriormente, é esse o produto da combustão que possui maior nível de emissões.

A distribuição espacial das frações molares de monóxido de nitrogênio, NO, apresentada na Figura 62, mostra que sua formação é acentuada após o PMS, possuindo seus maiores valores em torno de 11° do ângulo do virabrequim e, posteriormente apresenta uma maior difusão e homogeneidade em sua distribuição e com reduções em seu valor, vide diferença na escala de cores entre a quarta (com regiões mais avermelhadas) e a nona imagem (com regiões mais esverdeadas) da Figura 62, note que o mesmo comportamento foi descrito na Figura 53, que apresenta a variação média.

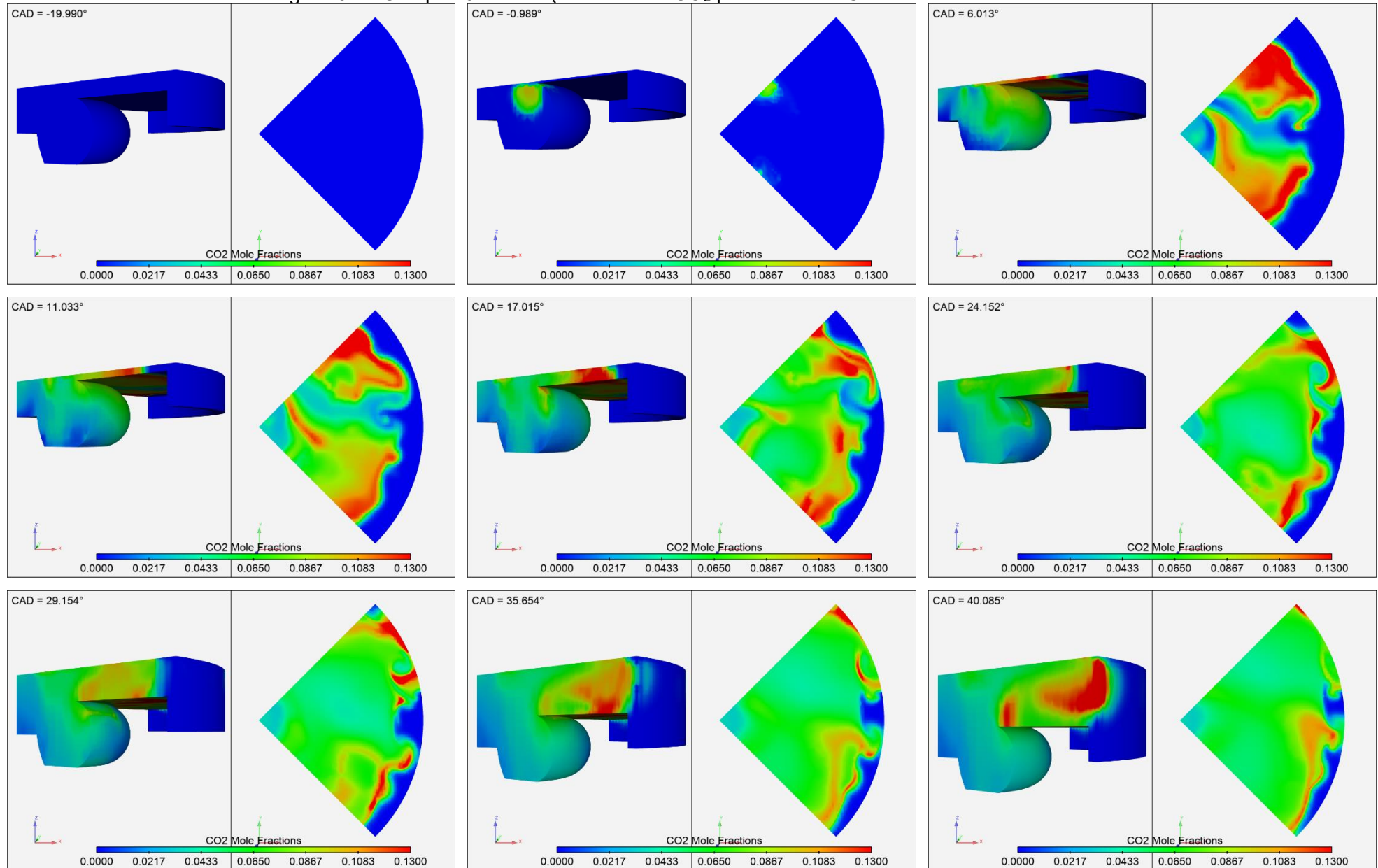
Por fim, a Figura 63 representa espacialmente a variação das frações molares de dióxido de nitrogênio, NO₂, na câmara de combustão, de onde observa-se que sua variação é iniciada de forma mais tardia, comparando-se com as frações molares de CO, CO₂ e NO, também apresentando maior homogeneidade em sua distribuição conforme o movimento do pistão afasta-se do PMS.

Figura 60 – Campos 3D de fração molar de CO para diversos CAD na combustão do diesel



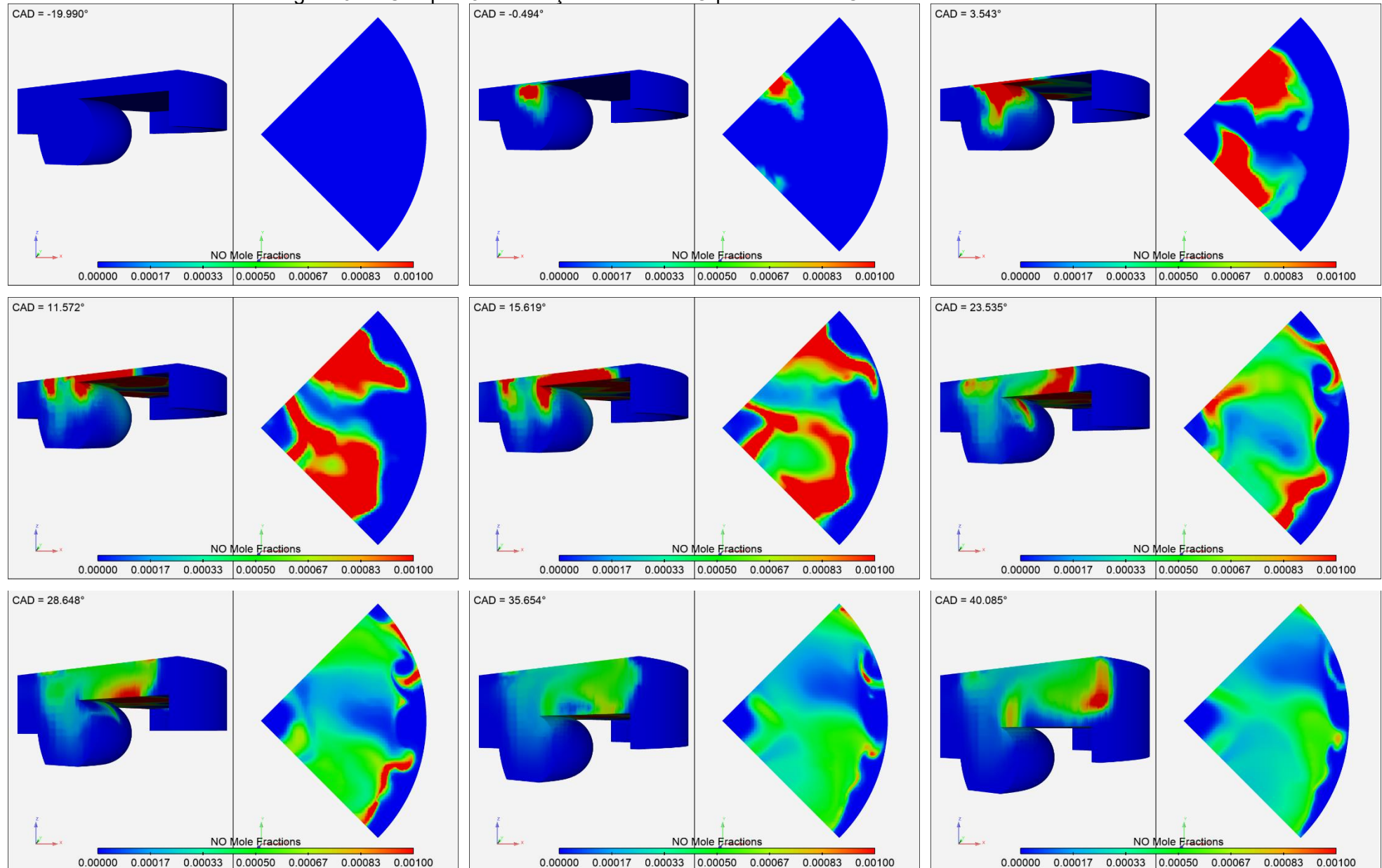
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 61 – Campos 3D de fração molar de CO₂ para diversos CAD na combustão do diesel



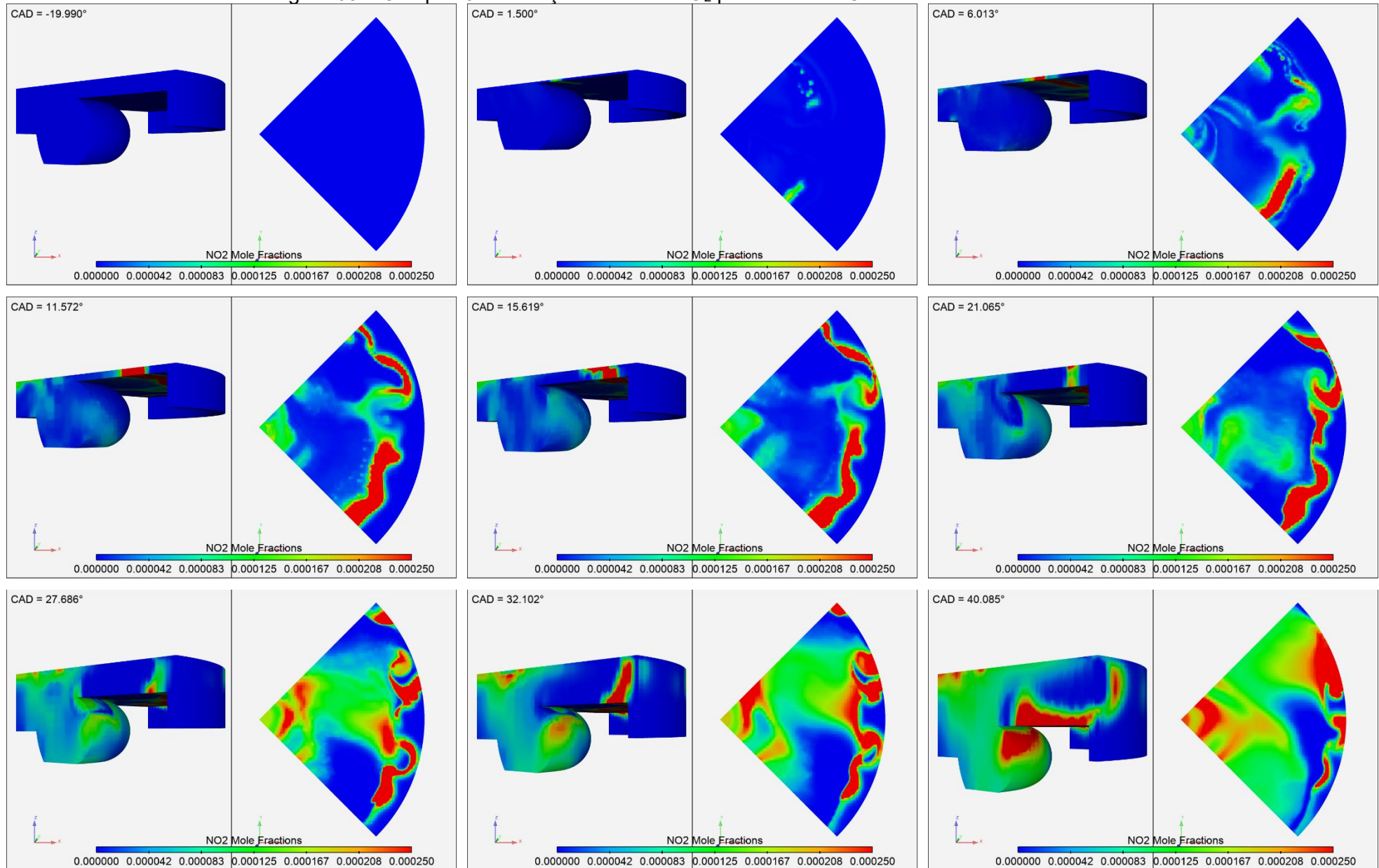
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 62 – Campos 3D de fração molar de NO para diversos CAD na combustão do diesel



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 63 – Campos 3D de fração molar de NO_2 para diversos CAD na combustão do diesel



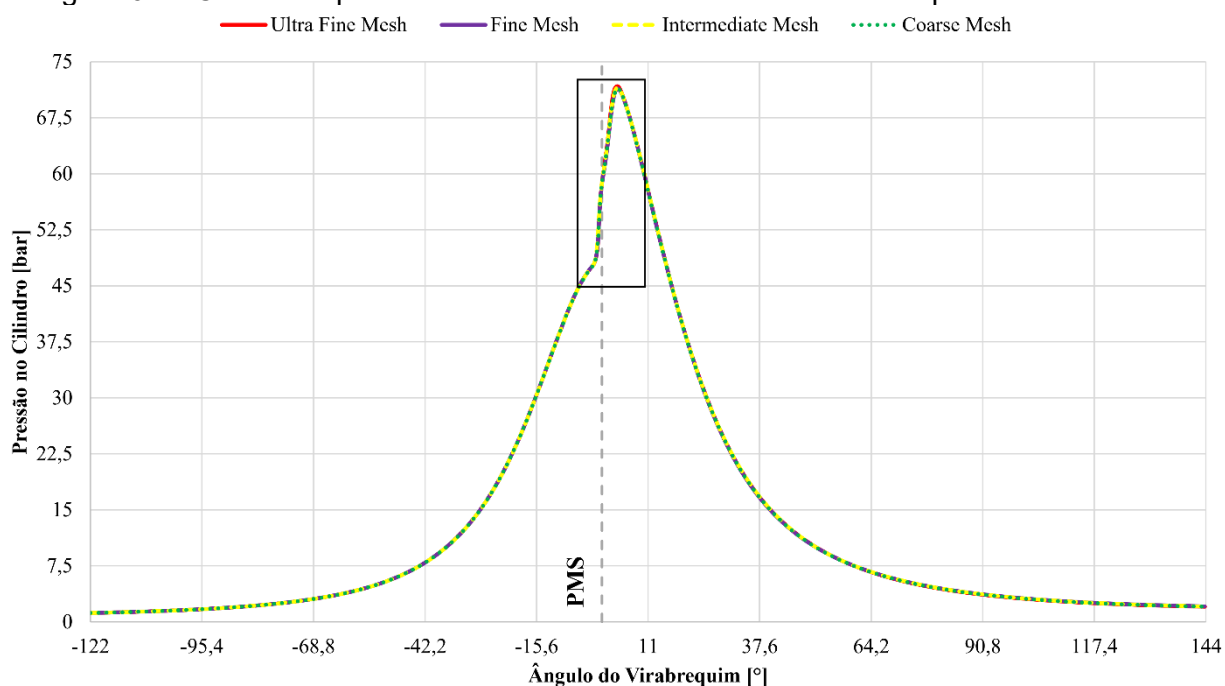
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

5.2.3 Análise de Independência de Malha

A fim de observar os efeitos dos diversos parâmetros considerados *a priori* e, também, para garantir a validade dos resultados obtidos computacionalmente, fez-se uma análise da independência de malha, considerando quatro malhas, cujas características foram definidas na Tabela 9.

A Figura 64 apresenta o resultado dos estudos de independência de malha computacional, realizados considerando-se as malhas descritas na Tabela 8 e os parâmetros descritos anteriormente para validação do modelo computacional, para a combustão do diesel puro. Na Figura 65 é apresentado o trecho ampliado para a parte selecionada da Figura 64, para melhor observação da variação da pressão em função da qualidade da malha computacional.

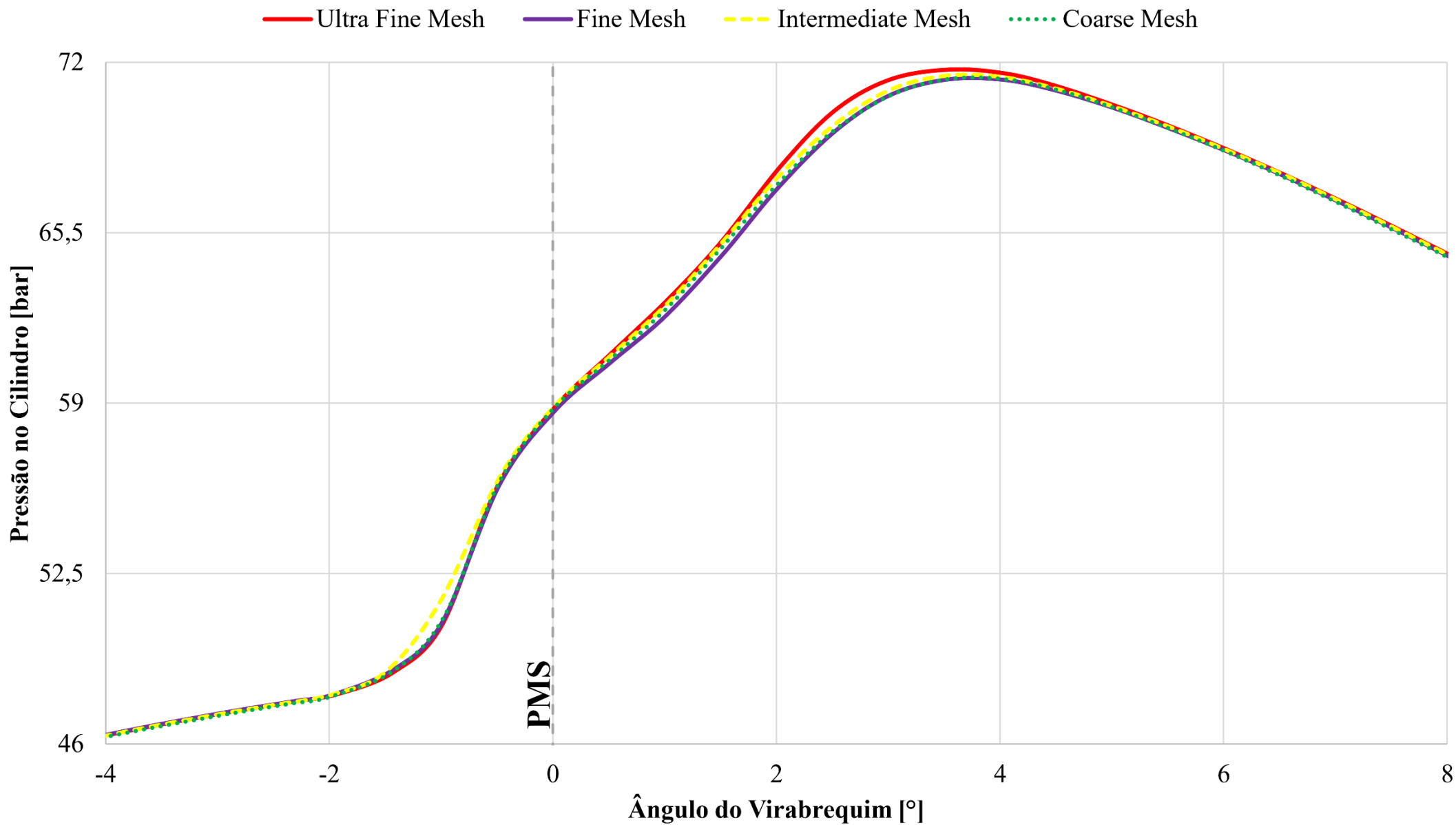
Figura 64 – Curvas de pressão no cilindro obtidas na análise da independência de malha



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Analisando os resultados apresentados nas Figuras 64 e 65, observa-se que há uma boa concordância entre os resultados obtidos para a pressão no cilindro considerando todas as malhas testadas, sendo os erros para os picos de pressão menores que 2% para todas as malhas em comparação com o pico obtido pela malha super refinada (Ultra Fine Mesh).

Figura 65 – Zoom da curva de pressão no cilindro para análise da independência de malha

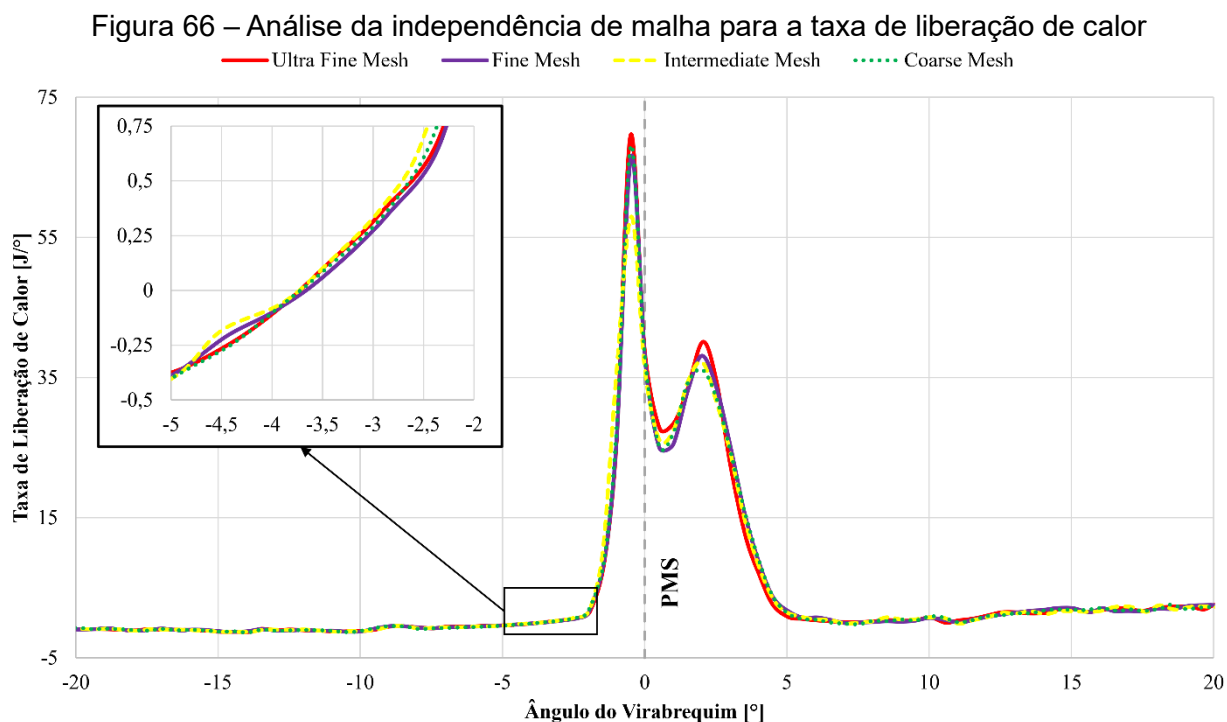


Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Análises de independência de malhas empregadas nas simulações de motores de combustão interna, em sua maioria, consideram apenas a variação na quantidade de células presentes na discretização espacial. Além disso, a variação dos resultados na curva de pressão no cilindro relatada em muitos trabalhos também é bem pequena. Estudos de malhas similares ao realizado neste trabalho e com conclusões análogas podem ser encontrados, por exemplo, em: Han e Reitz (1995); Huang, Hong e Huang (2015); Zhou, D. Z. *et al.* (2015); Plengsa-ard e Kaewbumrung (2018); Sener *et al.* (2019); Zhang *et al.* (2019) e Balijepalli *et al.* (2021).

Ressalta-se ainda que a qualidade nos resultados obtidos na análise de independência de malha, deve-se também ao fato de o Forte utilizar uma técnica de adaptabilidade da malha computacional, ou seja, a técnica de malha dinâmica, durante toda a simulação em virtude das condições de operação do motor, contribuindo na acurácia dos resultados CFD, mesmo considerando malhas espaciais menos refinadas.

Além de observar os efeitos da qualidade de malha na pressão no cilindro, apresenta-se também seus efeitos na taxa de liberação de calor (AHRR) na Figura 66, com o intuito de verificar se haverá alguma influência na determinação numérica do ponto de início da combustão, SOC.



A partir do trecho ampliado da curva de AHRR apresentado na Figura 66, nota-se que para todas as malhas testadas, as estimativas para o início da combustão serão muito próximas entre si, bem como a maior parte do comportamento dessa curva, apenas para os pontos de máximo e de mínimo há diferença entre si, principalmente para a malha intermediária, que apresenta o menor valor do ponto máximo de AHRR.

Um compilado das principais características do ciclo analisado nas simulações, pico de pressão cilindro, $p_{\text{máx}}$; da pressão média efetiva indicada, IMEP; das eficiências de combustão, η_{comb} , e térmica, η_{term} ; do trabalho, W_{ind} , da potência, Pot_{ind} , e do consumo de combustível específico, ISFC, brutos indicados; da liberação de calor acumulada, das emissões de poluentes ao final da simulação, no ponto de abertura da válvula de exaustão (EVO), e o tempo de simulação gasto para cada malha é apresentado na Tabela 12.

Tabela 12 – Análise de algumas características do ciclo de combustão considerando a qualidade das malhas 3D da câmara de combustão

Malha/ Características	Grosseira	Intermediária	Refinada	Muito Refinada
$p_{\text{máx}}$ [bar]	71,360	71,487	71,345	71,721
IMEP [bar]	3,7496	3,7903	3,7716	3,7617
$T_{\text{máx}}$ [K]	1472,757	1472,925	1471,938	1475,433
η_{comb} [%]	83,035	83,560	83,751	82,900
η_{term} [%]	27,327	27,624	27,487	27,415
W_{ind} [J]	156,82	158,52	157,74	157,33
Pot_{ind} [kW]	2,352	2,378	2,366	2,360
ISFC [g/kWh]	295,908	292,728	294,182	294,955
Q_{acum} [J]	476,737	479,520	480,620	475,736
Fuligem _{EVO} [g/kg _{fuel}]	0,1089	0,1189	0,1380	0,1199
NO _x _{EVO} [g/kg _{fuel}]	13,656	15,020	12,862	14,438
CO _{EVO} [g/kg _{fuel}]	6,621	6,808	8,055	7,039
UHC _{EVO} [g/kg _{fuel}]	21,206	19,780	20,719	22,307
VOC _{EVO} [g/kg _{fuel}]	22,297	20,807	21,810	23,415
CO ₂ _{EVO} [g/kg _{fuel}]	2504,814	2519,463	2524,399	2499,317
t_{sim} [h]	8,73	9,12	11,74	20,93

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A partir dos resultados obtidos na análise de independência de malha, considerando as características térmicas apresentadas na Tabela 12, linhas 1 a 9, o maior erro percentual obtido, em relação à malha muito refinada foi de 1,027% observado para a eficiência da combustão e o calor liberado acumulado ao se utilizar a malha refinada.

Por sua vez, para as emissões, linhas 10 a 15 da Tabela 12, houve uma grande variação no erro percentual em todas as malhas empregadas, sendo as maiores diferenças observadas para a fuligem e CO, 15,1% e 14,4%, respectivamente, ao se empregar a malha refinada e 11% para UHC e VOC ao se empregar a malha intermediária. Esses erros foram obtidos através de uma equação similar à Eq. (100), trocando-se o valor do experimento pelo obtido com a malha muito refinada.

Considerando tempo computacional gasto em cada uma das simulações e apresentado na linha 16 da Tabela 12, houve uma redução de 58,3%, 56,4% e 43,9% do em relação ao tempo gasto ao se utilizar a malha muito refinada.

Em suma, a partir da análise de independência de malha, e balanceando as diferenças percentuais entre os valores obtidos em relação à malha muito refinada, nota-se que todas as malhas espaciais consideradas nesse trabalho apresentaram resultados satisfatórios, juntamente com as características de refinamentos e de malha adaptativa que o Forte utiliza.

5.3 Combustão *Single-fuel* com HVO

Inicialmente, para se obter resultados das simulações computacionais referentes à combustão do HVO Puro, foi realizada a adaptação do modelo cinético D35sp. Posteriormente, a partir desse modelo cinético adaptado, foram realizadas as simulações tridimensionais no Forte.

Os mesmos valores para a duração de injeção, a quantidade de parcelas no *spray*, a temperatura de injeção do combustível e o ângulo de cone considerados para o diesel puro foram também utilizados para o HVO puro, bem como as constantes de modelagem da velocidade de chama laminar e turbulenta, por serem parâmetros de extrema complexidade e que vão além do escopo deste trabalho.

5.3.1 Adaptação do modelo cinético para HVO

A adaptação para obtenção de um modelo cinético de combustão do HVO puro seguiu a metodologia descrita na Seção 4.4.3.1 deste texto. Considerando as análises da taxa de liberação de calor e de sensibilidade, foram escolhidas oito reações para se modificar os fatores pré-exponenciais, A , da lei de Arrhenius pelo processo de otimização mono-objetivo. Essas reações, bem como os valores originais e modificados desses fatores são apresentados na Tabela 13, onde os números das reações referem-se ao modelo D35sp, descrito no ANEXO A.

A obtenção dos resultados nessa etapa foi feita em um computador com sistema operacional Windows 10 de 64 bits, com memória RAM de 8,0 GB e processador Intel Core i7-9750H CPU @ 2.60 GHz com SSD na versão 2021 R1 do ANSYS Chemkin-Pro.

Tabela 13 – Resultados dos fatores pré-exponenciais para o modelo cinético HVO Puro, com o melhor ajuste após 50 iterações

Nº	Reação Química	A original	A modificado
2	$\text{NC}_7\text{H}_{16} + \text{OH} = \text{C}_7\text{H}_{15-2} + \text{H}_2\text{O}$	$9,700 \cdot 10^9$	$8,46254969 \cdot 10^9$
26	$\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$	$8,990 \cdot 10^7$	$7,64150000 \cdot 10^7$
27	$\text{O} + \text{OH} = \text{O}_2 + \text{H}$	$4,000 \cdot 10^{14}$	$3,40000000 \cdot 10^{14}$
29	$\text{OH} + \text{OH} = \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	$6,000 \cdot 10^8$	$6,39641639 \cdot 10^8$
30	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	$3,600 \cdot 10^{17}$	$3,17076738 \cdot 10^{17}$
34	$\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} = \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$	$5,563 \cdot 10^{10}$	$5,38927890 \cdot 10^{10}$
39	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} = \text{CH}_2\text{O} + \text{CH}_3$	$6,000 \cdot 10^{13}$	$5,25060539 \cdot 10^{13}$
40	$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} = \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$	$8,020 \cdot 10^{13}$	$7,77817358 \cdot 10^{13}$

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

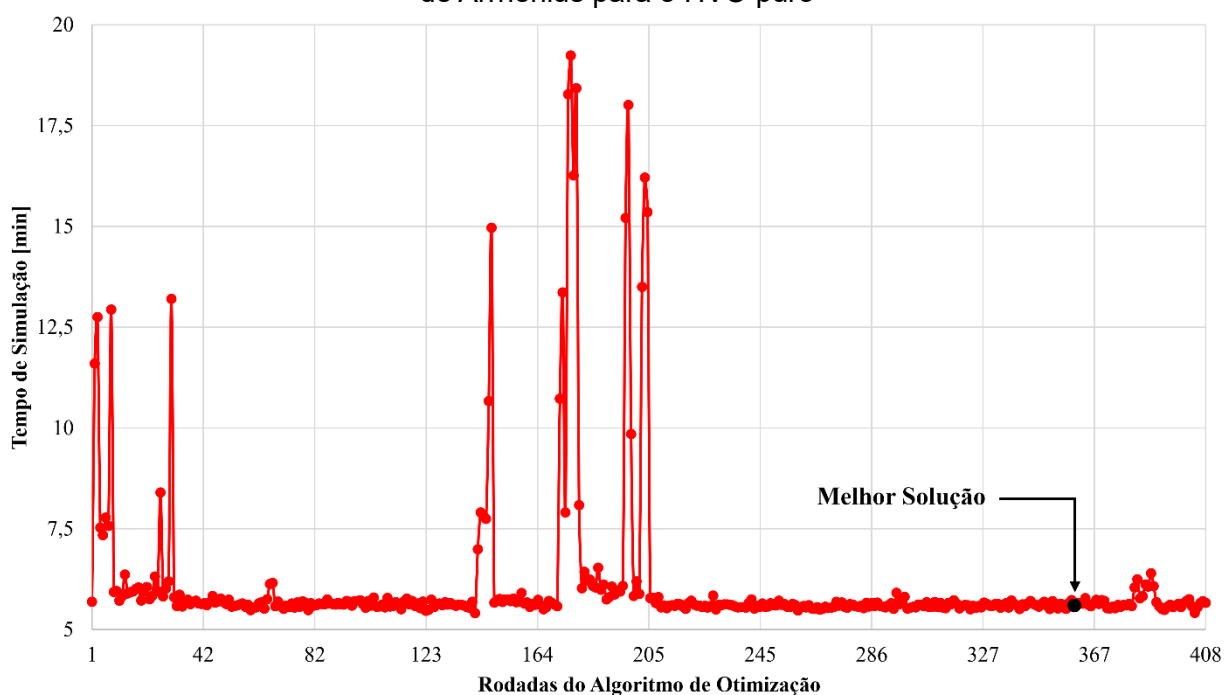
Os intervalos superior, UB (*Upper Bounds*), e inferior, LB (*Lower Bounds*), para obtenção das estimativas dos valores de A , utilizados no algoritmo de Lichtenberg, foram tomados como sendo 15% a mais ou a menos dos valores originais, similar ao realizado no trabalho de Rahimi, Fatehifar e Saray (2010), ou seja, $UB = 1,15 \cdot OB$ e $LB = 0,85 \cdot OB$, onde OB são os valores originais, descritos na 3ª coluna da Tabela 13.

Além disso, o número máximo de iterações foi definido como 50, sendo que a cada iteração foram distribuídas 8 populações distintas, totalizando assim 408 rodadas do algoritmo, haja visto que a primeira iteração é contada apenas após as 8 primeiras rodadas da primeira distribuição populacional serem finalizadas.

A estimativa para o SOC, foi feita pela curva de PRR, seguindo o procedimento descrito em Xin (2013) e exemplificado anteriormente na Seção 5.2.2, vide Figura 45.

Todas as distribuições populacionais para os parâmetros A dentro dos intervalos considerados e das 408 rodadas do algoritmo obtiveram solução física, ou seja, foram capazes de prever as etapas de compressão, injeção, ignição e expansão para o ciclo analisado ($-122^\circ \leq \text{CAD} \leq 144^\circ$). Em média, cada rodada demorou 6,12 minutos para obter uma solução. A Figura 67 mostra como foi a variação temporal das simulações, sendo que o tempo para obtenção da solução com o menor erro total é destacado por um ponto preto no gráfico, tempo este igual a 5,6 min. A soma temporal de todas as rodadas do algoritmo foi de 41,6 horas, ou seja, esse foi o tempo de duração para a finalização das 50 iterações no processo de otimização.

Figura 67 – Variação do tempo de simulação para otimização do fator pré-exponencial da lei de Arrhenius para o HVO puro

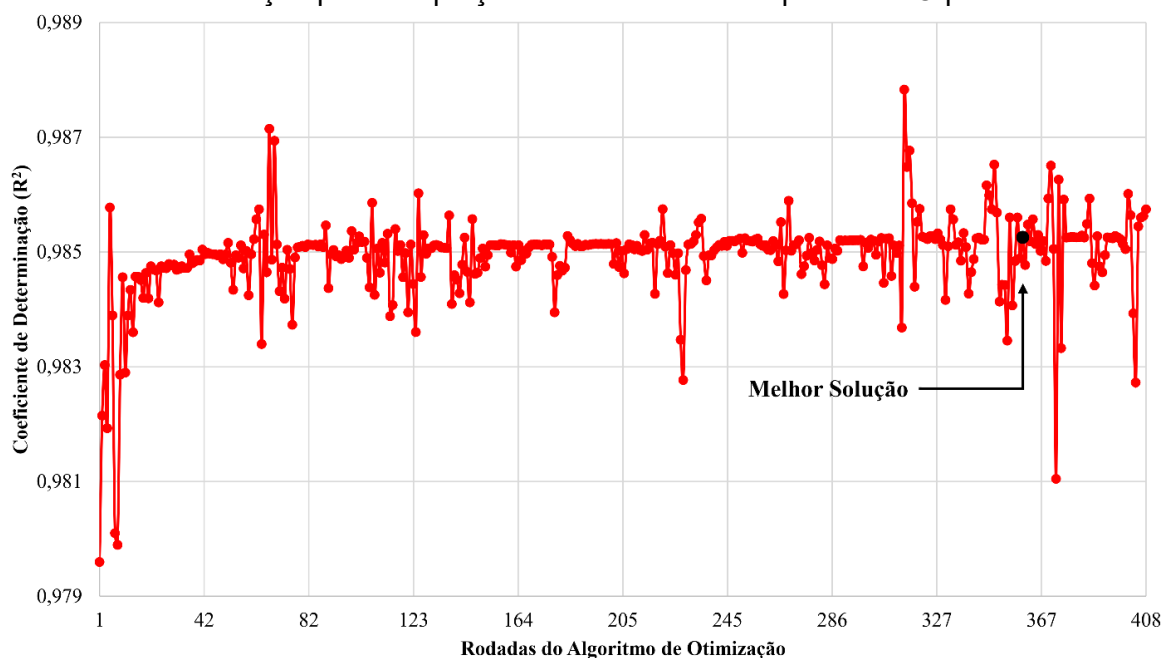


Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

As Figuras 68 e 69 apresentam a variação do coeficiente de determinação, R^2 , e do erro percentual total ponderado, EP_{total} , em função das rodadas do algoritmo de otimização. A solução escolhida para rodar o modelo cinético no CFD, com menor EP_{total} , e descrito na Tabela 13, é destacado por um ponto na cor preta nas figuras.

Analisando a Figura 68, observa-se que praticamente em quase todas as soluções obtidas, o valor de R^2 é superior a 0,983, o que caracteriza um ótimo ajuste entre as curvas experimental e computacional obtida através do modelo cinético adaptado empregado na abordagem 0-D. Nota-se ainda que não há grandes oscilações para esse parâmetro.

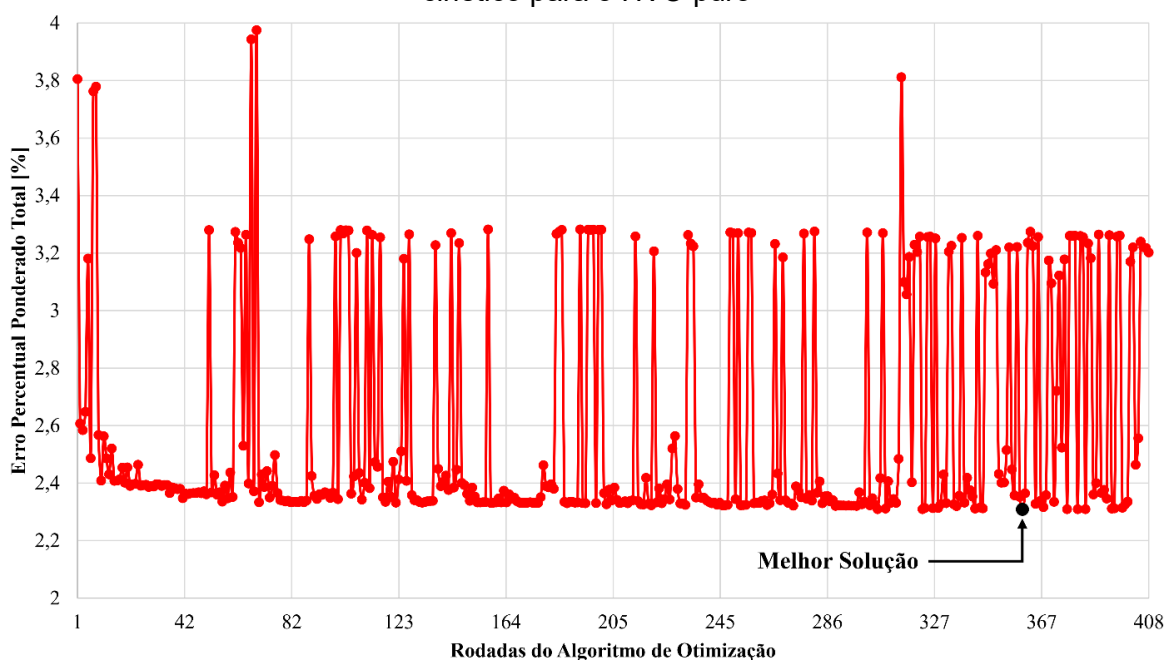
Figura 68 – Variação do coeficiente R^2 para todas as rodadas obtidas no processo de otimização para adaptação do modelo cinético para o HVO puro



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Por sua vez, para o erro percentual final ponderado, esboçado na Figura 69, há uma maior oscilação entre os valores encontrados. No entanto, mesmo com essas oscilações, a maioria dos resultados obtidos possui $\%EP_{total} \leq 3\%$, o que também indica uma boa correlação entre os valores máximos de pressão no cilindro experimental e obtido pela abordagem 0-D com o modelo cinético adaptado.

Figura 69 – Variação do erro percentual total final ponderado para a adaptação do modelo cinético para o HVO puro



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

O melhor resultado entre todas as rodadas, destacado por pontos pretos nos gráficos anteriores e cujos valores de A foram apresentados na Tabela 13, foi obtido na rodada de número 360 e possui os seguintes parâmetros de análise de erros e ajuste, definidos na Seção 4.4.3.1 nas Eqs. (69), (72), (73) e (74), respectivamente:

$$\begin{aligned} R^2 &\cong 0,985256 \\ ER_{p_{m\acute{a}x}} &\cong 0,047489 \cong 4,75\% \\ ER_{SOC} &\cong -0,049068 \cong -4,91\% \\ EP_{total} &\cong 2,309\% \end{aligned}$$

No cálculo do erro relativo total apresentado anteriormente, foram considerados os seguintes pesos, vide Eq. (74): $W_{p_{m\acute{a}x}} = 0,15$, $W_{SOC} = 0,10$ e $W_{R^2} = 0,75$. Esses pesos foram escolhidos a fim de se considerar a maior contribuição para o ajuste entre as curvas experimental e do modelo ajustado.

O modelo adaptado é então carregado na parte “Models – Chemistry” do Forte para realizar as simulações tridimensionais, cujos resultados são apresentados na seção seguinte.

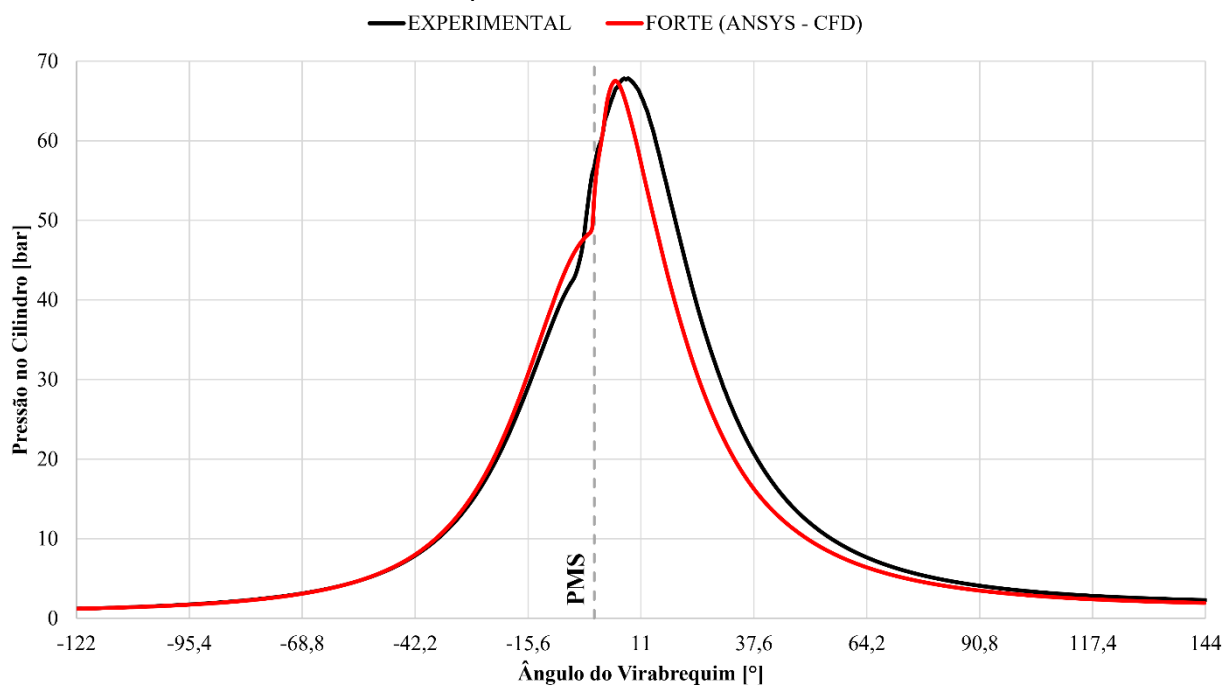
5.3.2 Simulações 3D para a combustão do HVO

Nas análises realizadas nessa seção, foi considerada a malha intermediária, descrita anteriormente, o modelo cinético adaptado obtido na Seção 5.3.1 e as características de modelagem do spray e da injeção obtidas na Seção 5.2.2. A Figura 70 compara as curvas de pressão no cilindro obtidas pelo Forte e experimentalmente.

Observando a Figura 70, nota-se que há uma boa concordância entre a curva simulada no Forte para o HVO puro com sua respectiva curva experimental na parte relativa à compressão e antes do início da injeção. Posteriormente há uma discordância entre as curvas, especialmente na fase de combustão pré-misturada, similar ao observado para o diesel puro, levando à compreensão que essa discordância pode estar relacionada ao modelo cinético reduzido, D35sp, empregado em todas as simulações. Porém o valor máximo da pressão obtido na simulação 3D ($p_{m\acute{a}x} = 67,511$ bar) possui uma subestimação de apenas 0,461% em relação ao valor obtido nos experimentos ($p_{m\acute{a}x} = 67,823$ bar). Além disso, verifica-se também que a curva obtida pelo Forte possui uma predição do início da ignição mais atrasada em relação ao valor experimental, seguindo o mesmo comportamento observado na etapa

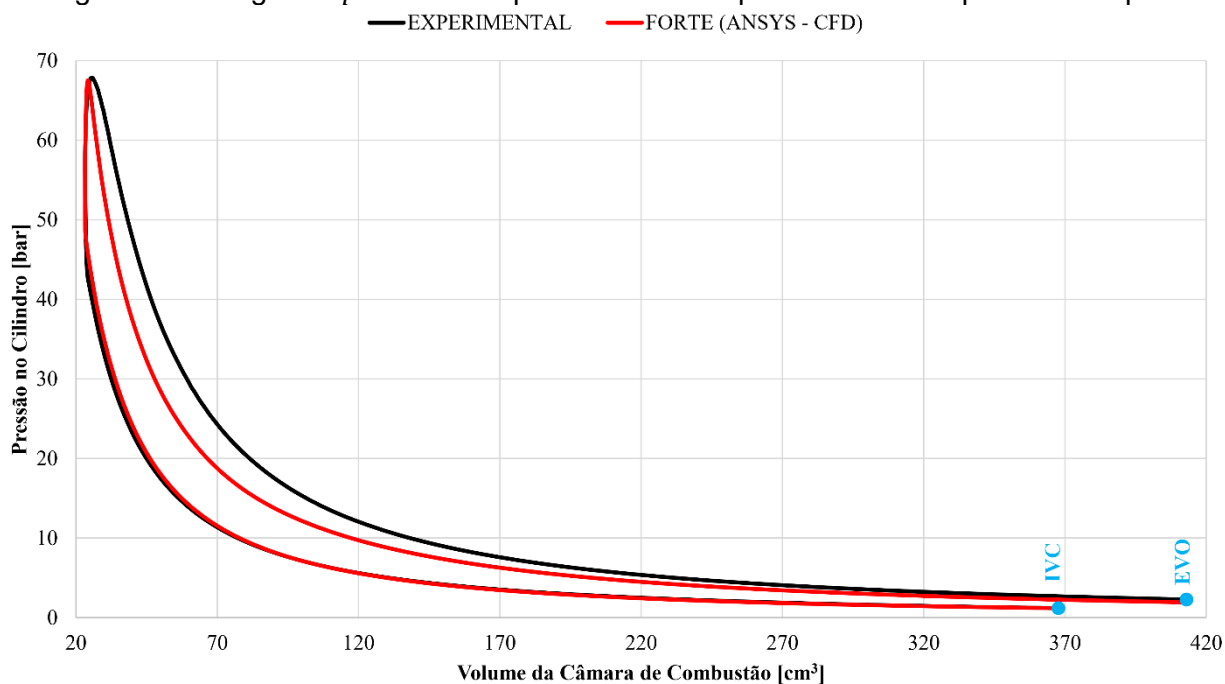
de validação para o diesel puro e, novamente, justifica-se essa diferença pelo modelo cinético reduzido que considera apenas 35 espécies e 74 reações químicas.

Figura 70 – Validação da curva de pressão no cilindro CFD para o HVO puro com o modelo cinético adaptado e com a malha intermediária



Na Figura 71 são traçados os diagramas pressão-volume experimental e computacional, para o motor operando com HVO puro.

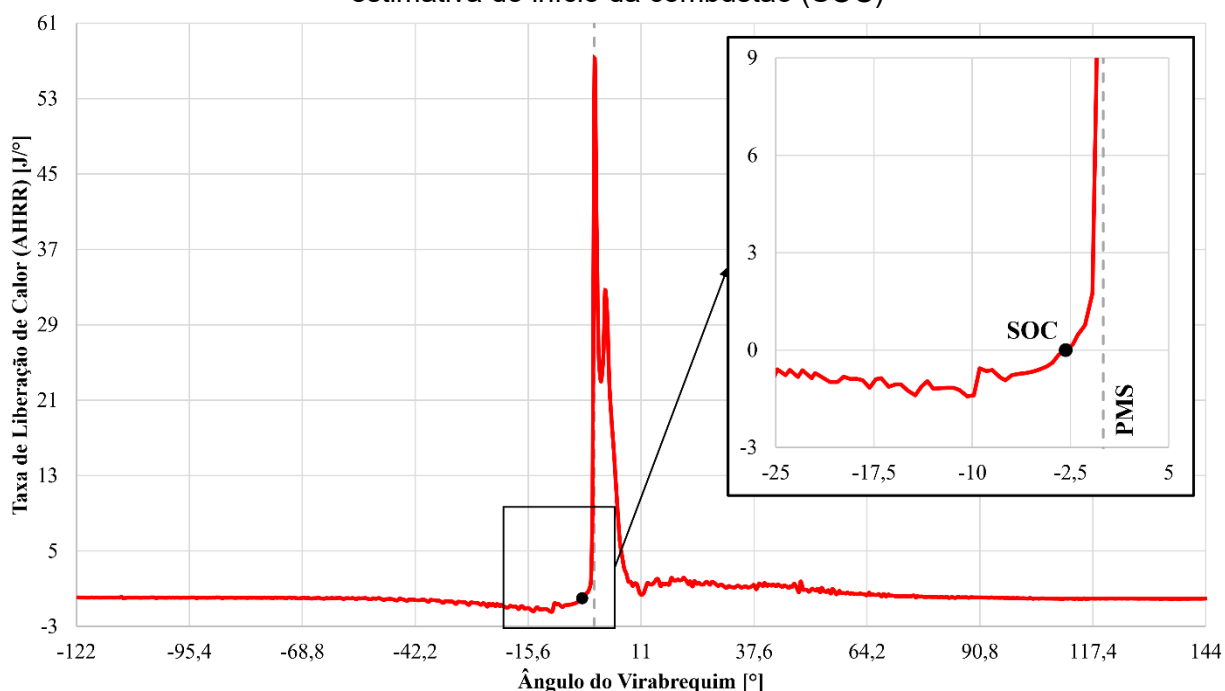
Figura 71 – Diagrama $p-v$ obtido experimental e computacionalmente para o HVO puro



Assim como observou-se para o diagrama $p-v$ para o caso *single-fuel* com diesel, também para a combustão *single-fuel* com HVO há uma concordância entre as curvas obtidas pela simulação CFD (ANSYS – Forte) e pelo experimento. Além disso, há também uma concordância com a curva teórica, apresentada na Figura 11.

A Figura 72 apresenta a variação da taxa de liberação de calor para o HVO puro obtida pelo Forte, sendo destacado o ponto de início da combustão, obtido por uma interpolação linear entre os valores negativo ($AHRR = -0,02894 \text{ J/}^\circ \rightarrow CAD = -2,96649^\circ$) e positivo ($AHRR = 0,17198 \text{ J/}^\circ \rightarrow CAD = -2,32173^\circ$) de AHRR, estimando-se então $SOC \cong -2,874^\circ$.

Figura 72 – Taxa de liberação de calor obtida nas simulações CFD para o HVO puro e estimativa do início da combustão (SOC)



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Representações espaciais para os campos de temperatura, velocidade e emissões para o HVO puro também foram obtidas e serão apresentadas ao final deste capítulo, juntamente com os campos 3D obtidos para o caso *dual-fuel* HVO-Biogás.

5.4 Combustão *Dual-fuel* com HVO e Biogás

Similar ao realizado na Seção 5.3 deste trabalho, para o HVO puro, para o caso *dual-fuel* também foi obtido primeiramente um modelo cinético adaptado para descrever a combustão da mistura HVO-Biogás e, posteriormente, realizou-se a

simulação CFD. Nas análises *dual-fuel* considerou-se apenas a vazão mássica de 0,2 kg/h, considerando o escopo inicial do trabalho e o grande custo computacional associado à análise de todas as vazões mássicas, ficando como sugestão de trabalhos futuros a análise das demais vazões mássicas e comparações entre si.

5.4.1 Adaptação do modelo cinético para HVO com Biogás

Considerando as análises da taxa de liberação de calor e de sensibilidade, foram escolhidas além das oito reações já consideradas para o HVO puro, mais uma reação química para se modificar os fatores pré-exponenciais na lei de Arrhenius, como descrito na Seção 4.4.3.1. Esta reação considerada o metano (reação #48 no ANEXO A). Além disso, também se teve de modificar as frações molares dos fluidos provenientes do tubo de admissão, ou seja, do ar (espécies N_2 e O_2) e inserindo o biogás (espécies CH_4 e CO_2), considerando os valores apresentados na Tabela 11.

As reações que tiveram seu fator pré-exponencial modificado, bem como seus valores originais e modificados são apresentados na Tabela 14. A obtenção dos resultados nessa etapa foi feita em um computador com sistema operacional Windows 10 de 64 bits, com memória RAM de 16,0 GB e processador Intel Core i7-2600 CPU @3.40 GHz na versão 2021 R1 do ANSYS Chemkin-Pro, sendo considerada a mesma variação nos limites de busca, UB e LB , que no caso *single-fuel*.

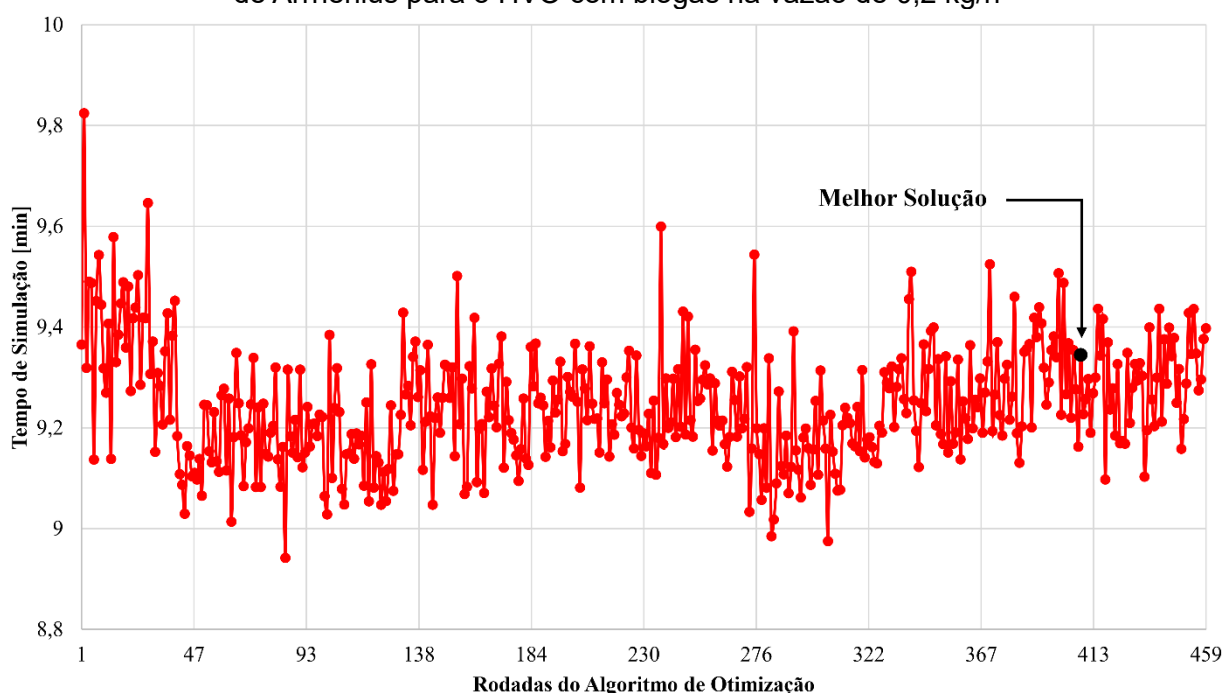
Tabela 14 – Resultados dos fatores pré-exponenciais para o modelo cinético *dual-fuel* do HVO com biogás na vazão de 0,2 kg/h, com o melhor ajuste após 459 rodadas

Nº	Reação Química	A original	A modificado
2	$NC_7H_{16} + OH = C_7H_{15-2} + H_2O$	$9,700 \cdot 10^9$	$9,697934861 \cdot 10^9$
26	$CO + OH = CO_2 + H$	$8,990 \cdot 10^7$	$8,074171701 \cdot 10^7$
27	$O + OH = O_2 + H$	$4,000 \cdot 10^{14}$	$4,036136729 \cdot 10^{14}$
29	$OH + OH = O + H_2O$	$6,000 \cdot 10^8$	$6,665083368 \cdot 10^8$
30	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	$3,600 \cdot 10^{17}$	$3,843888800 \cdot 10^{17}$
34	$CH_2O + OH = HCO + H_2O$	$5,563 \cdot 10^{10}$	$5,274972844 \cdot 10^{10}$
39	$C_2H_4 + OH = CH_2O + CH_3$	$6,000 \cdot 10^{13}$	$5,100596393 \cdot 10^{13}$
40	$C_2H_4 + OH = C_2H_3 + H_2O$	$8,020 \cdot 10^{13}$	$6,817000000 \cdot 10^{13}$
48	$CH_4 + OH = CH_3 + H_2O$	$1,600 \cdot 10^6$	$1,814747904 \cdot 10^{13}$

Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

O melhor resultado, cujos fatores pré-exponenciais foram apresentados na Tabela 14, foi obtido na rodada 408 do algoritmo. Além disso, das 459 rodadas realizadas, todas apresentaram solução física. Para finalização das 50 iterações, considerando 9 populações em cada uma, gastou-se 70,72 horas, sendo uma média de aproximadamente 9,24 minutos para cada rodada. A variação temporal das simulações para as rodadas do algoritmo de otimização é apresentada na Figura 73.

Figura 73 – Variação do tempo de simulação para otimização do fator pré-exponencial da lei de Arrhenius para o HVO com biogás na vazão de 0,2 kg/h



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

As Figuras 74 e 75 apresentam a variação para o coeficiente de determinação, R^2 , e para o erro percentual total ponderado, EP_{total} , para o processo de otimização do modelo adaptado para o HVO-Biogás em função das rodadas do algoritmo de otimização.

Considerando os mesmos pesos de importância da análise de erros e de ajuste de curva considerados para o caso da adaptação do modelo cinético para o HVO puro, o melhor resultado para o modelo adaptado HVO-Biogás foi obtido quando:

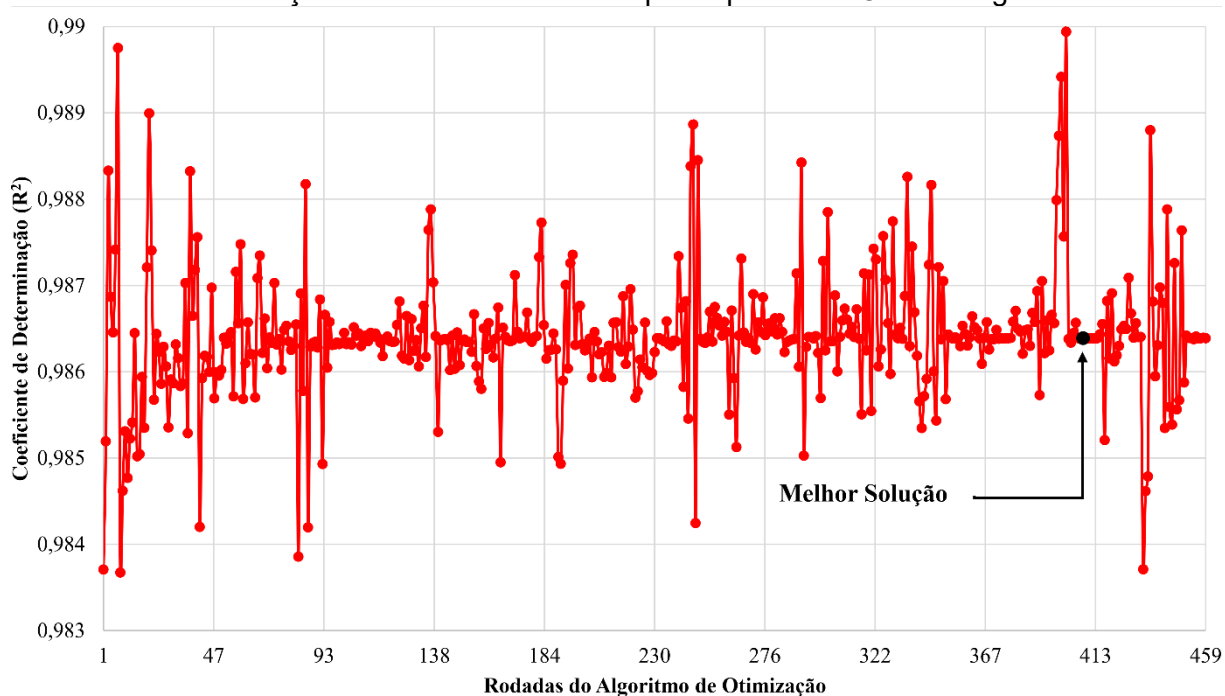
$$R^2 \cong 0,986389$$

$$ER_{P_{m\acute{a}x}} \cong 0,069724 \cong 6,97\%$$

$$ER_{SOC} \cong 0,023541 \cong 2,35\%$$

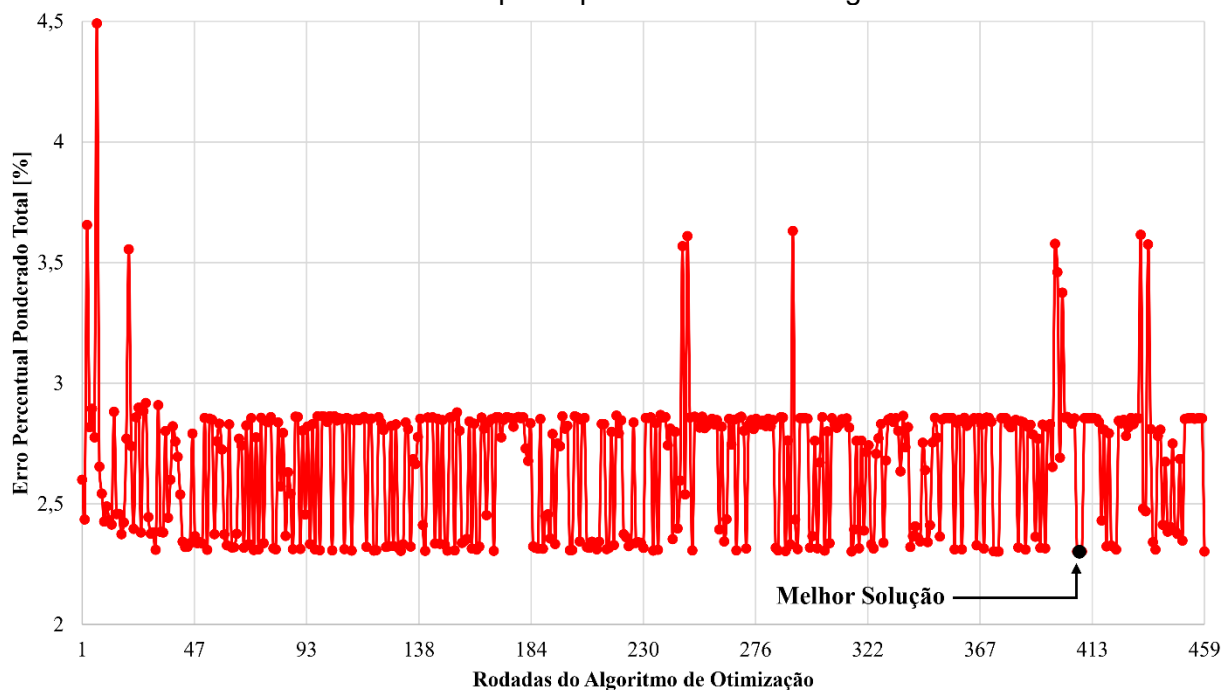
$$EP_{total} \cong 2,302\%$$

Figura 74 – Variação do coeficiente R^2 para todas as rodadas obtidas no processo de otimização do modelo cinético adaptado para o HVO com biogás



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 75 – Variação do erro percentual total final ponderado para obtenção do modelo cinético adaptado para o HVO com biogás



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Comparando-se com os resultados obtidos para o caso *single-fuel*, o erro relacionado ao pico de pressão foi superior para o caso *dual-fuel*, o que pode estar relacionado com a necessidade de uma nova calibração para a duração da injeção do

combustível primário no caso *dual-fuel*, haja visto que, como o seu valor foi reduzido, provavelmente sua duração da injeção deveria ser aumentada, o que elevaria o pico de pressão no cilindro e reduziria esse erro, porém essa análise fica como sugestão de trabalhos futuros. Por sua vez, o erro relativo à estimativa do início da combustão e o valor do coeficiente R^2 , que mensura o ajuste entre as curvas experimental e computacional, deram valores menores que para o caso *single-fuel*, o que contribuiu para uma redução no erro percentual total ponderado.

Comparando-se as Figuras 67 e 73 nota-se que o tempo para obtenção do modelo cinético adaptado sofreu mais oscilações para o caso *dual-fuel* que para o caso *single-fuel*. O mesmo comportamento foi observado para a variação de R^2 , vide Figuras 68 e 74, enquanto que para EP_{total} observou-se menores oscilações para o caso *dual-fuel*, como esboçado nas Figuras 69 e 75.

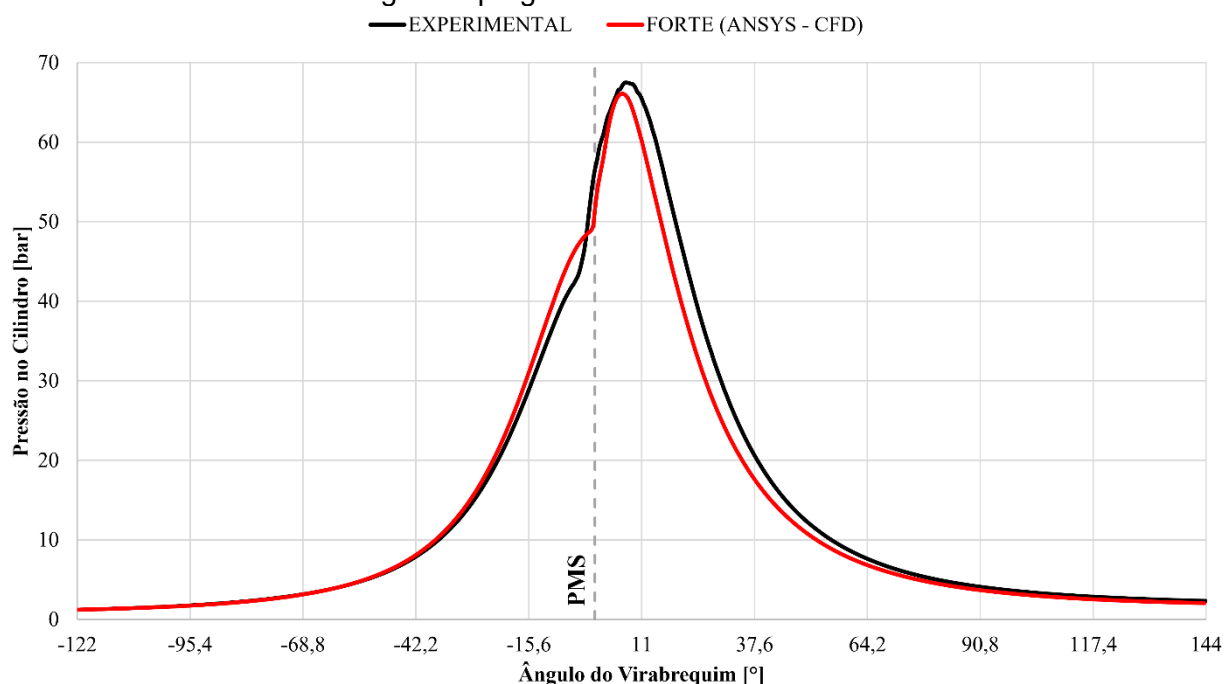
Identicamente ao realizado para o caso *single-fuel*, o modelo adaptado obtido para o caso *dual-fuel* também é carregado na aba “Models – Chemistry” do Forte para realizar as simulações 3D, cujos resultados são apresentados na seção seguinte.

5.4.2 Simulações 3D para a combustão do HVO com Biogás

Ressalta-se que para essa análise 3D *dual-fuel*, fez-se necessária a inserção das espécies químicas do biogás (CH_4 e CO_2) na inicialização dos fluidos presentes na câmara de combustão no início da simulação, como discutido na Seção 4.5.2 e apresentado na Figura 36, com os respectivos valores apresentados na Tabela 11.

A Figura 76 apresenta a curva de pressão no cilindro obtida pelas simulações 3D para o caso *dual-fuel* e a compara com a curva obtida experimentalmente. Pode-se observar que há uma boa correlação entre as curvas de pressão no cilindro, similar à observada para os casos *single-fuel*, também apresentando uma combustão mais atrasada. Obteve-se uma subestimação de 2,055%, calculado pela Eq. (100), para o valor máximo da pressão, sendo obtido $p_{m\acute{a}x} = 66,087$ bar para a simulação CFD enquanto que para o experimento foi obtido $p_{m\acute{a}x} = 67,473$ bar.

Figura 76 – Validação da curva de pressão no cilindro CFD para a combustão de HVO com biogás empregando a malha intermediária



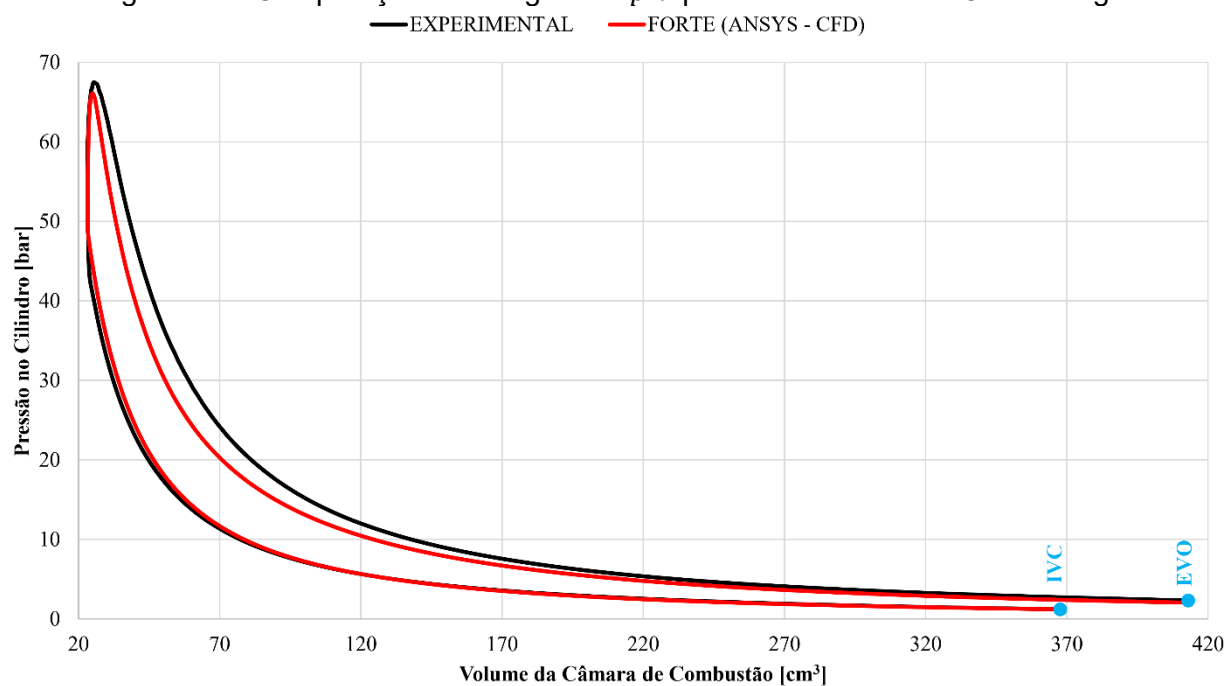
Dos valores obtidos para o volume e a pressão no cilindro traça-se o diagrama pressão-volume para a combustão do HVO com biogás. Esse diagrama é apresentado na Figura 77 e foi comparado ao diagrama obtido experimentalmente.

As mesmas observações para o diagrama $p-v$ feitas para as simulações CFD *single-fuel* podem também ser feitas para a combustão *dual-fuel*, sendo que o menor pico de pressão observado para o caso *dual-fuel*, já foi discutido anteriormente. Porém nota-se que há uma ótima correlação entre as curvas computacional e experimental e, também, com o perfil de curva teórica, vide Figura 11.

A Figura 78 apresenta a variação da taxa de liberação de calor para a combustão *dual-fuel* de HVO com biogás e evidencia o ponto de início de combustão, SOC. O valor de SOC obtido pelo Forte, foi estimado em $SOC \cong -2,460^\circ$ a partir de uma interpolação linear entre os valores negativo ($AHRR = -0,01405 \text{ J}/^\circ \rightarrow CAD = -2,5^\circ$) e positivo ($AHRR = 0,174526 \text{ J}/^\circ \rightarrow CAD = -1,96874^\circ$) para AHRR após o início da injeção e antes do ponto morto superior.

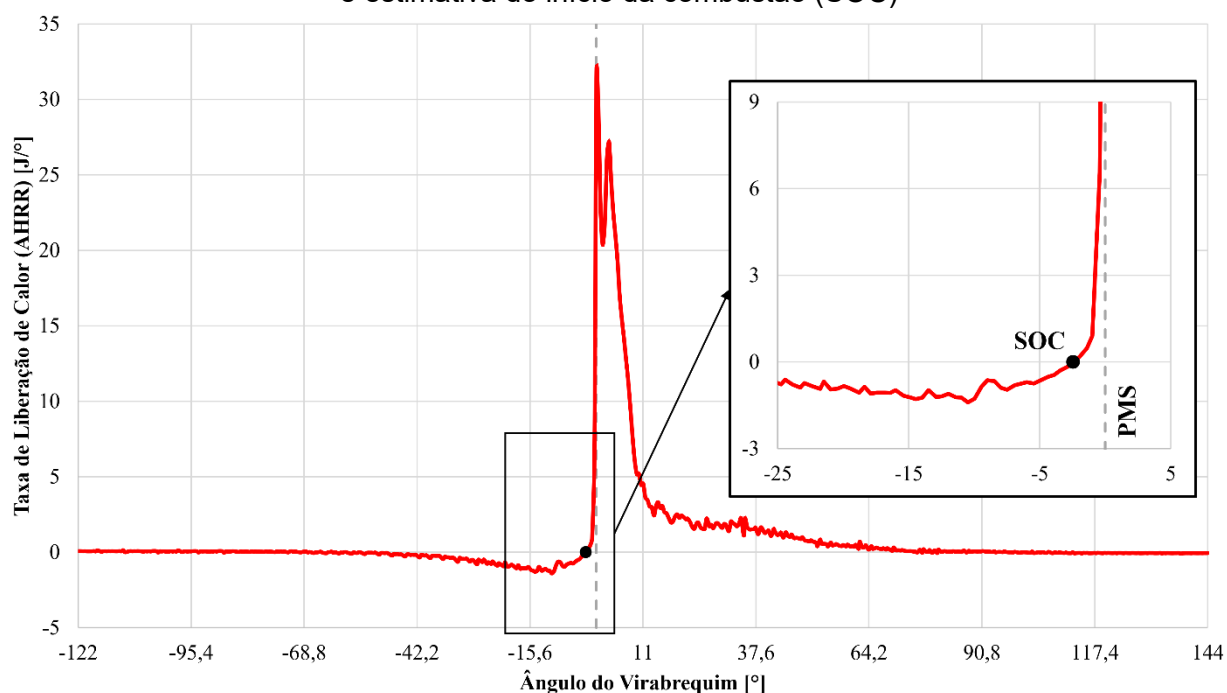
Como foi empregado o mesmo modelo cinético original, D35sp (vide ANEXO A), mas com os fatores pré-exponenciais da lei de Arrhenius adaptados para o caso *dual-fuel*, a curva de AHRR seguiu um padrão similar ao obtido para a combustão *single-fuel*. Logo, podem ser feitas as mesmas observações.

Figura 77 – Comparação dos diagramas $p-v$ para a mistura de HVO com biogás



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 78 – Taxa de liberação de calor obtida nas simulações CFD para o HVO com biogás e estimativa do início da combustão (SOC)



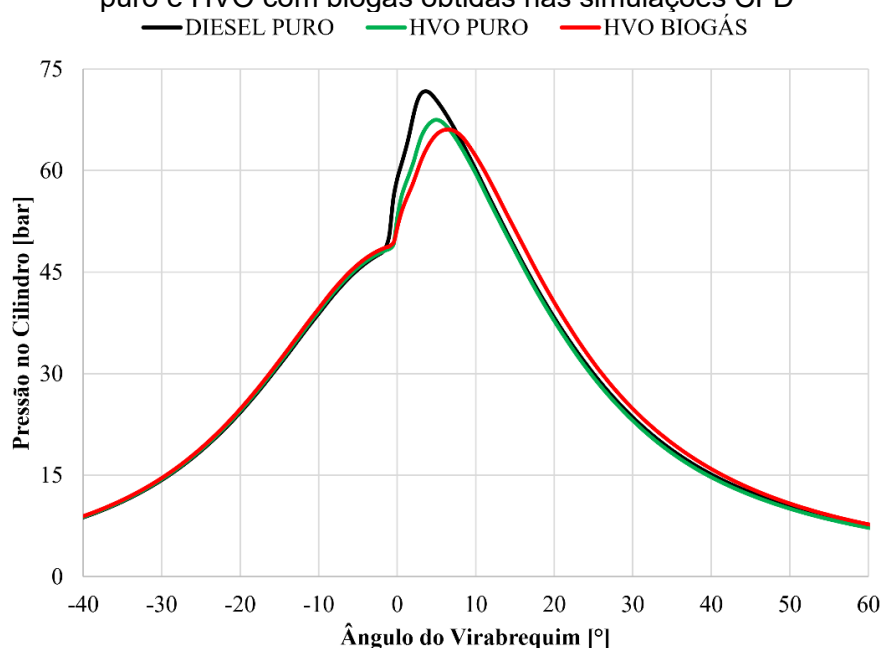
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A próxima seção, apresenta as principais curvas obtidas para os combustíveis considerados nesse trabalho: diesel puro, HVO puro e HVO com biogás.

5.5 Análises Gerais da Combustão Para Todos os Combustíveis

Nessa seção são compactados e comparados alguns dos resultados obtidos nas análises de combustão para os três combustíveis considerados nesse trabalho. As Figuras 79 a 82 comparam graficamente a variação da pressão no cilindro, a taxa de aumento de pressão no cilindro e as emissões de NOx e de fuligem em função do ângulo do virabrequim.

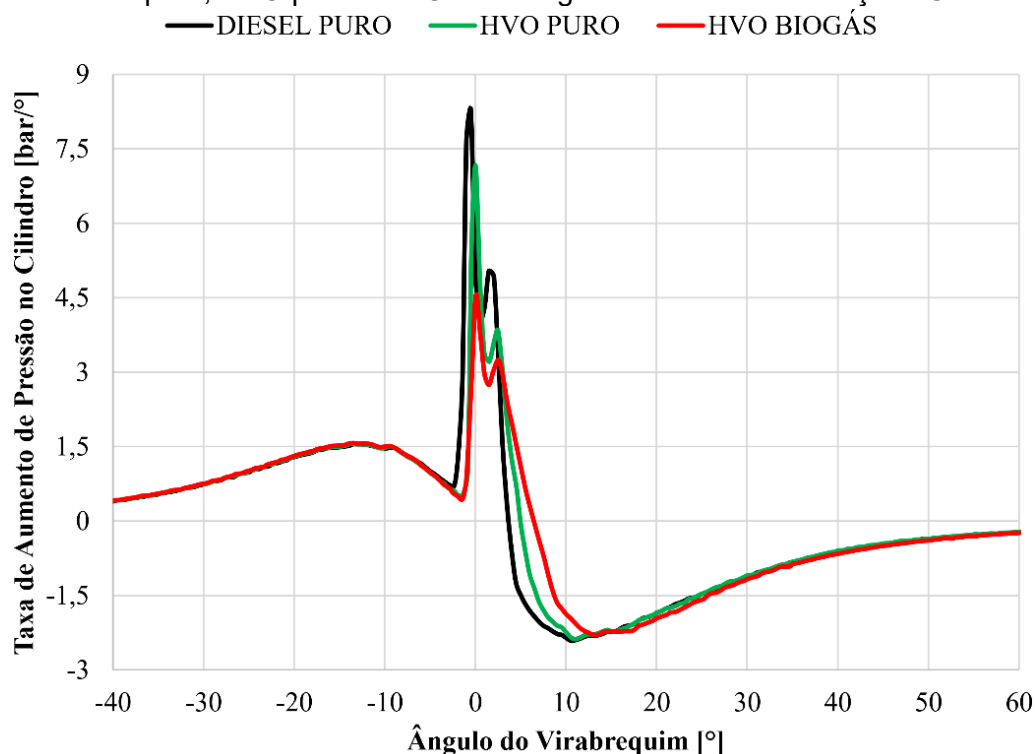
Figura 79 – Comparação das pressões no cilindro para a combustão de diesel puro, HVO puro e HVO com biogás obtidas nas simulações CFD



Analisando as curvas de pressão no cilindro para os três combustíveis, nota-se o que já foi comentado na Seção 5.1 para os resultados experimentais: que o pico de pressão se reduz ao se trocar o combustível puro, de diesel para HVO, e, também ao se inserir biogás na combustão com HVO. Redução essa que é mais expressiva para os casos *single-fuel*, similar ao observado experimentalmente. Além disso, nota-se também que a curva é deslocada para a direita, ou seja, o início da combustão é retardado tanto para o HVO puro, em relação ao diesel puro, quanto para a mistura HVO-Biogás, em relação ao HVO puro, padrão também observado nos experimentos.

Similar ao observado para a curva de pressão no cilindro, a taxa de aumento de pressão (PRR) segue o mesmo comportamento, ao se comparar os casos *single-fuel*, diesel e HVO, e *dual-fuel*, HVO e HVO-Biogás.

Figura 80 – Comparação das taxas de aumento de pressão (PRR) para a combustão de diesel puro, HVO puro e HVO com biogás obtidas das simulações CFD



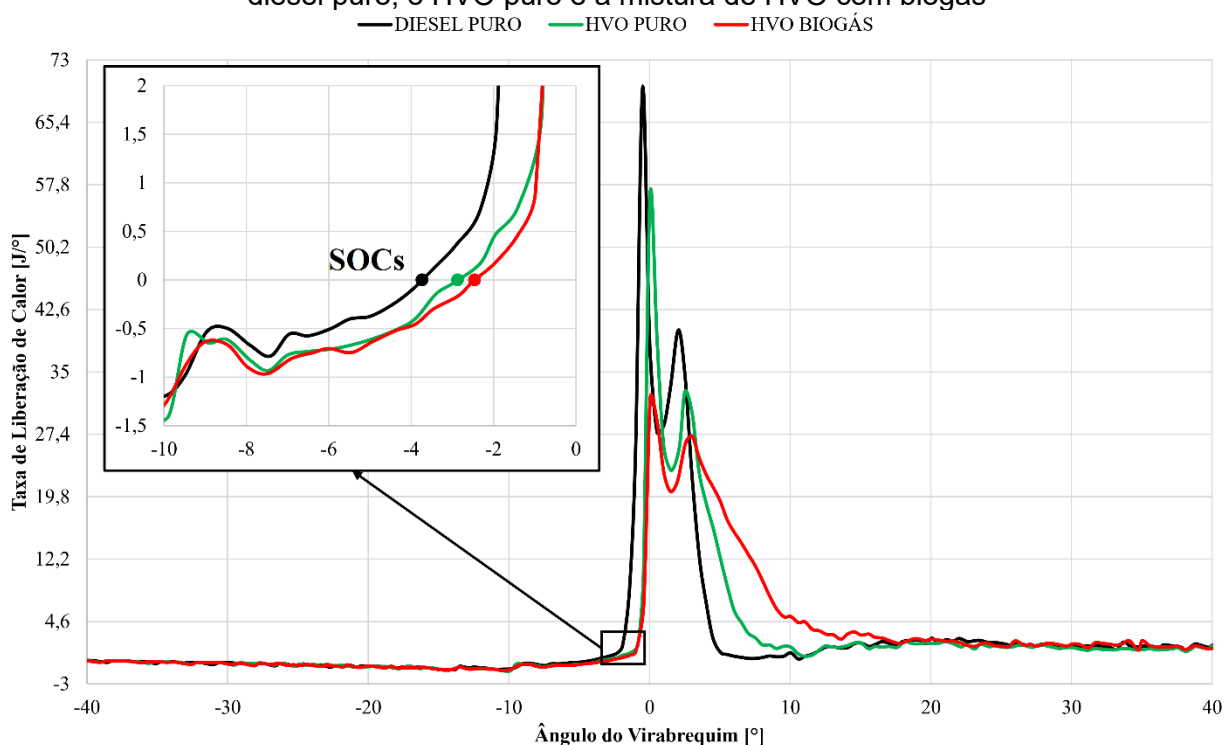
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

A partir da Figura 80, nota-se nitidamente que os picos de PRR decrescem para os três combustíveis, assim como o valor onde se inicia a parte relativa à combustão difusa (ponto de mínimo logo após o valor máximo de PRR). Nota-se visualmente a diferença do início da combustão para os casos *single-fuel* na curva de PRR, como descrito pela abordagem de Xin (2013), ou seja, o ponto de mínimo logo após o início da injeção, mas para os casos *single-fuel* e *dual-fuel* envolvendo o HVO essa diferença não é tão nítida, para tal observação e comparação, a Figura 81 apresenta as curvas das taxas de liberação de calor (AHRR) evidenciando a obtenção dos SOC para cada caso, destacados pelos pontos no zoom à esquerda do gráfico, cujos valores já foram apresentados nas respectivas seções anteriores.

Analisando a Figura 81, observa-se que há uma maior diferença entre os SOC nos casos *single-fuel* que para o caso *dual-fuel*, essa menor diferença de SOC entre HVO puro e HVO-Biogás está relacionada com a baixa taxa de substituição do combustível primário (HVO) pelo combustível secundário (biogás). Nota-se ainda da Figura 81, que os maiores picos para a taxa de liberação de calor são para a combustão do diesel puro, seguido do HVO puro e da mistura HVO-Biogás. Observa-se ainda que para os casos com HVO e HVO-Biogás, cujos modelos cinéticos foram

obtidos considerando uma adaptação em relação aos resultados experimentais, a parte relativa à combustão difusa é melhor representada que para o diesel puro.

Figura 81 – Comparação das taxas de liberação de calor obtidas das simulações para o diesel puro, o HVO puro e a mistura de HVO com biogás



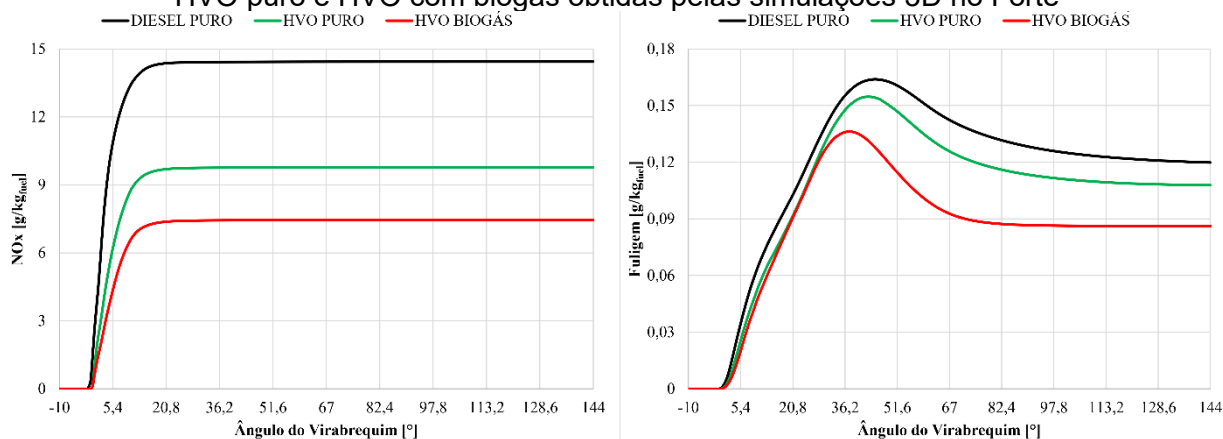
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

As reduções causadas nos picos da pressão e da taxa de liberação de calor para os casos *single* e *dual-fuel* estão relacionados com a menor quantidade de HVO na câmara de combustão, em razão da taxa de substituição do combustível gasoso e, ainda, a presença de biogás na câmara de combustão, que acarreta na redução da quantidade de oxigênio e retarda o processo de combustão, efeito que é acentuado devido a presença de CO₂, que é um gás inerte, em sua composição. Isso também contribui para a redução nas emissões de NO_x, vide Figura 82. Além disso, a presença de biogás na câmara de combustão também contribui na redução do valor global do poder calorífico, em comparação com o HVO puro, causando também essa redução no valor máximo de AHRR. Reduções nos picos de pressão no cilindro, de PRR e de AHRR foram também observadas por Rimkus, Stravinskas e Matijošius (2020) tanto para o HVO comparado com o diesel fóssil quanto para o HVO-Biogás com o HVO.

As emissões de NO_x e fuligem são apresentadas na Figura 82, que mostram claramente que a utilização do diesel renovável reduz consideravelmente seus valores, redução mais expressiva para os níveis de NO_x. Essa comparação evidencia

o que já vem sendo discutido na literatura: o HVO é um importante aliado no combate às emissões de poluentes. Rimkus, Stravinskas e Matijošius (2020) também observaram reduções nas emissões de NO_x para a combustão de HVO-Biogás.

Figura 82 – Comparação das emissões de NO_x e fuligem para a combustão de diesel puro, HVO puro e HVO com biogás obtidas pelas simulações 3D no Forte



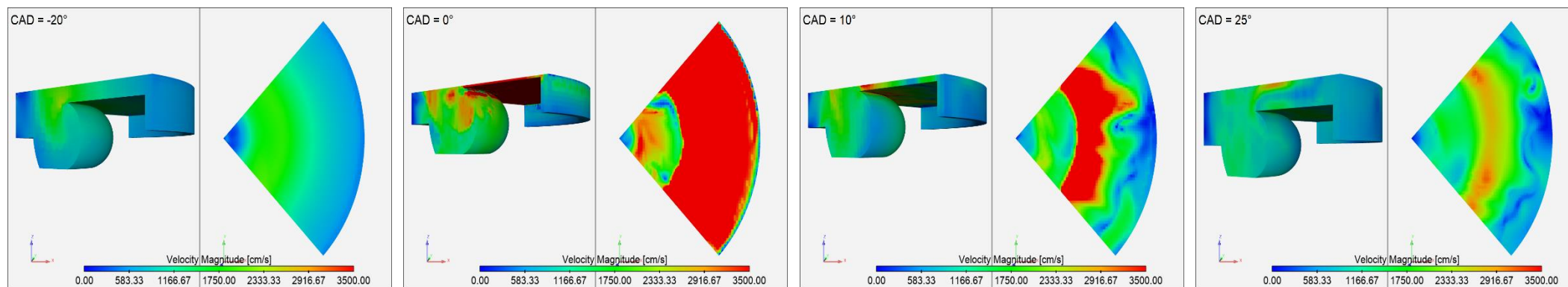
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Nas Figuras 83 e 84 são apresentados, respectivamente, os campos tridimensionais para a magnitude da velocidade e da temperatura dos fluidos na câmara de combustão em quatro ângulos do virabrequim. Já na Figura 85 são apresentados os campos tridimensionais para as emissões de CO, CO₂, NO e NO₂ ao final da simulação computacional, ou seja, no ponto de abertura da válvula de exaustão (EVO).

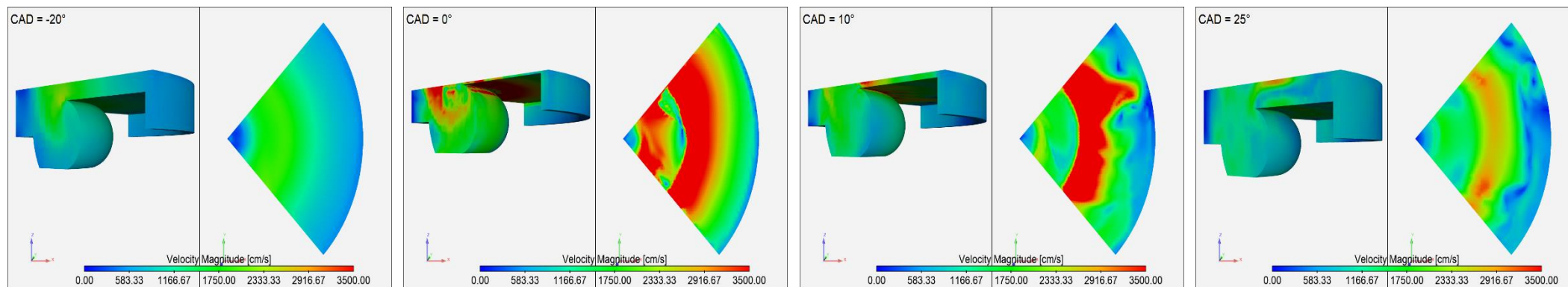
Analisando os campos da magnitude velocidade esboçados na Figura 83, nota-se para todos os casos, o que foi discutido anteriormente para o diesel puro, ou seja, um aumento em seu valor ao se avançar no ângulo do virabrequim, tendo seus maiores valores (indicados pelas regiões mais avermelhadas) no ponto morto superior (CAD = 0°), ou seja, região onde há maior aceleração do fluido e movimento mais turbulento, além de esta ser a posição do virabrequim com maior diferenciação espacial para a distribuição da velocidade, sendo o diesel puro aquele que possui maiores áreas avermelhadas no PMS, devido a este possuir uma combustão mais adiantada, quando comparada com os demais combustíveis analisados (vide Figura 81). Para os demais CAD apresentados, a variação espacial da velocidade é bem similar entre os três combustíveis. Além disso, comparando-se os casos *single-fuel* e *dual-fuel* com HVO, não há grande diferenciação na variação espacial da magnitude de velocidade, exceto para o PMS, onde o HVO possui mais regiões de aceleração.

Figura 83 – Campos 3D da magnitude de velocidade, para os três combustíveis, considerando diversos CAD

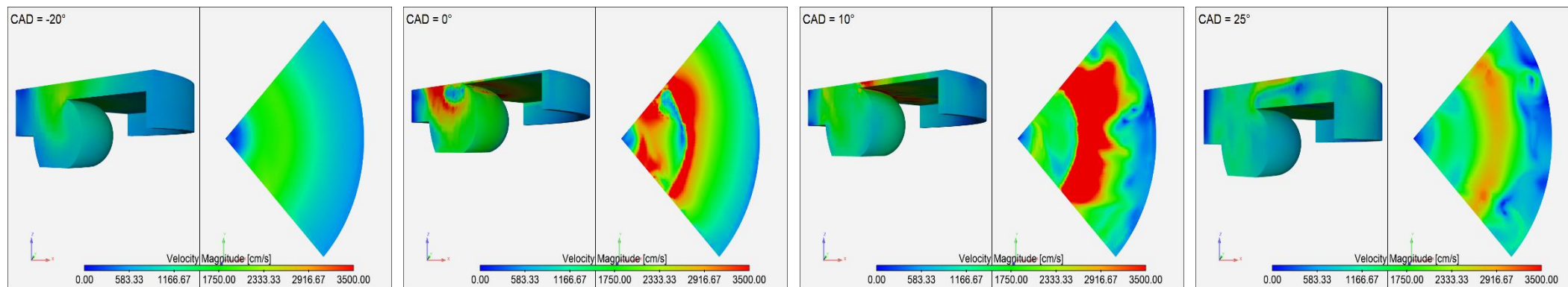
DIESEL
PURO



HVO
PURO



HVO-BIOGÁS



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Por sua vez, para os campos de temperatura apresentados na Figura 84, a variação espacial é mais divergente entre os três combustíveis, o que está relacionado com as diferenças observados na taxa de liberação de calor e o atraso no início da combustão, como apresentado na Figura 81.. Além disso, no PMS percebe-se que para o diesel puro há mais regiões com temperaturas mais elevadas, o que está relacionado com o maior atraso da ignição para a combustão *single* e *dual-fuel* do HVO.

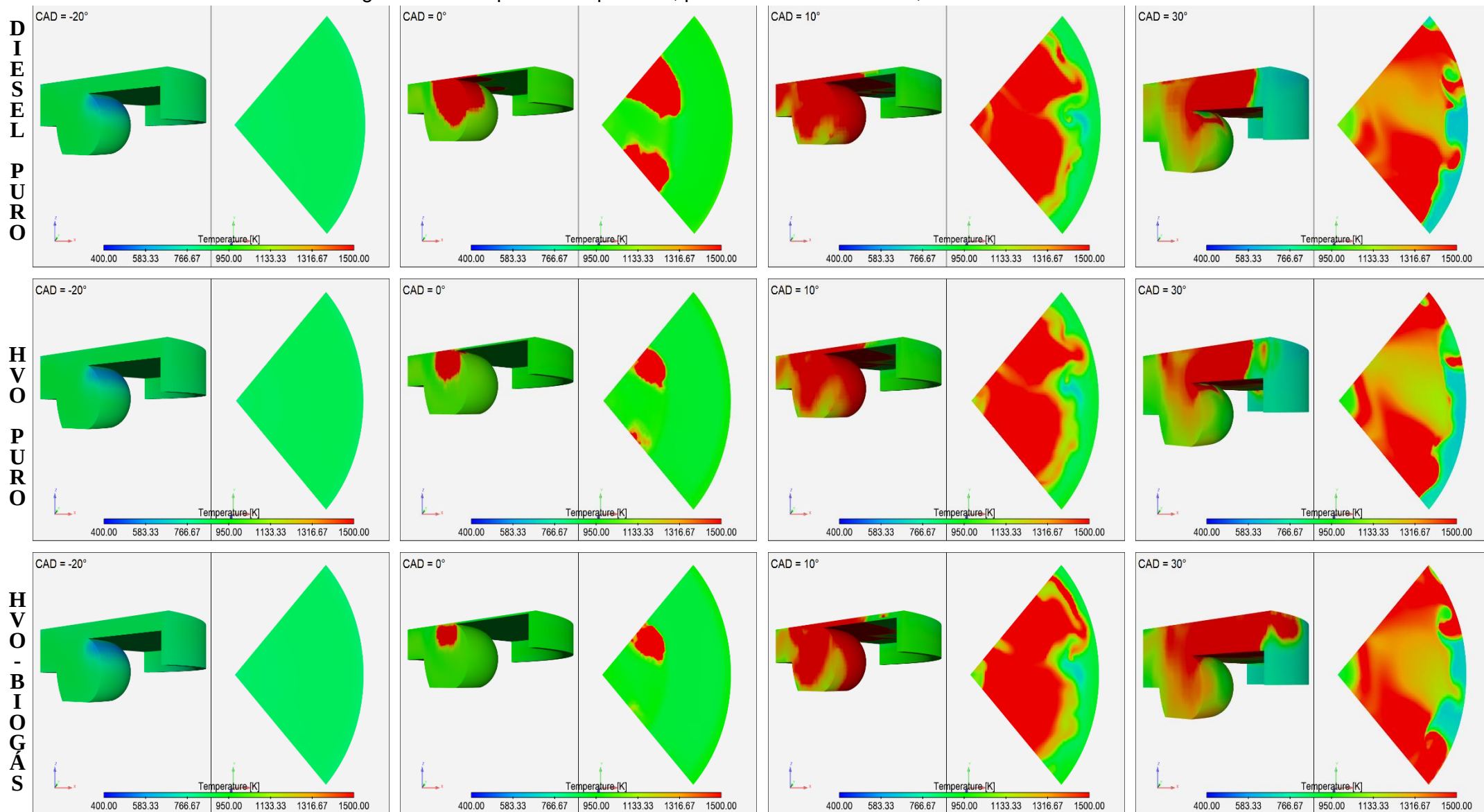
Observando a Figura 85, percebe-se um leve aumento na distribuição das emissões de monóxido de carbono (CO) de diesel para o HVO e de HVO para HVO-Biogás, o que pode estar relacionado com uma combustão mais incompleta para esses casos. Além disso, esse tênue aumento também se deve ao fato de tanto o diesel, quanto o HVO terem sido modelados com a mesma espécie química (nC_7H_{16}) nos seus respectivos modelos cinéticos, o que na realidade difere e onde observa-se, em geral, redução nas emissões de CO para a combustão do HVO, como apresentado nos resultados experimentais apresentados em Da Costa *et al.* (2022). No entanto, Rimkus, Stravinskas e Matijošius (2020) também observaram aumento nas emissões de monóxido de carbono, comparando-se HVO puro e HVO-Biogás.

A redução nas emissões de CO_2 para os casos *single-fuel* é clara essa redução nos campos apresentados na Figura 85 e também observada por Rimkus, Stravinskas e Matijošius (2020) e Da Costa *et al.* (2022) ao se utilizar o HVO. Porém, o que chamou à atenção foi o fato de as emissões de CO_2 reduzirem ao se inserir biogás para o caso *dual-fuel*, esperava-se um aumento em sua distribuição, todavia essa redução pode também estar relacionada à espécie química empregada no modelo cinético.

Analisando-se a Figura 85, verificou-se também uma redução nas emissões de NO e NO_2 para a combustão com HVO *single* e *dual-fuel*, mas houve um leve aumento nas emissões de NO_2 comparando-se a combustão de HVO com HVO-Biogás. No entanto, esse leve aumento não foi significativo, haja visto que, como mostrado na Figura 82, houve reduções nas emissões de NO_x .

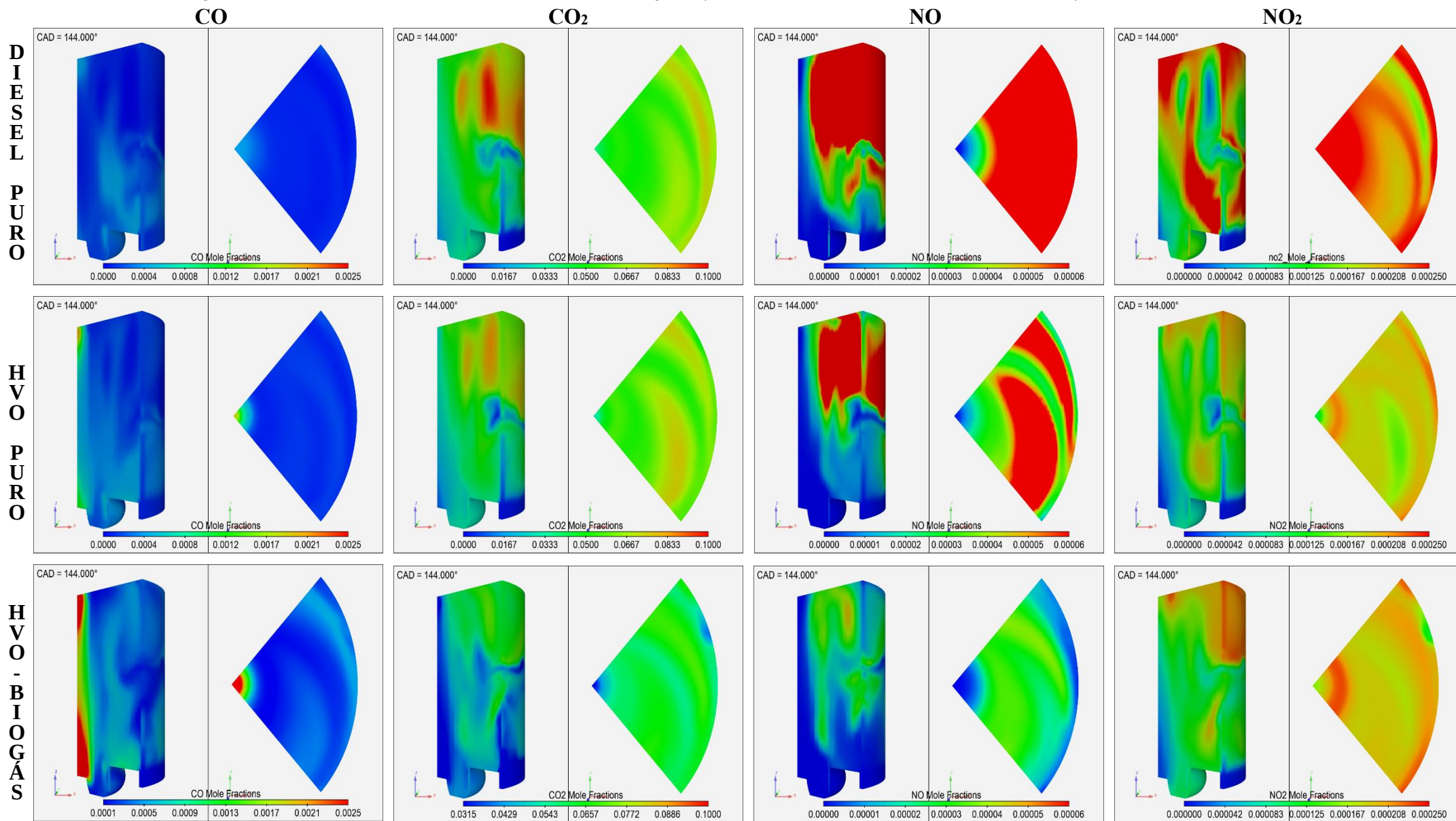
Ressalta-se ainda que devido à inovação do tema não foram encontrados trabalhos na literatura que façam estudo computacional da combustão de HVO, tendo assim dificuldades para maiores comparações e discussões dos resultados aqui obtidos, especialmente àqueles relacionados às variações 3D.

Figura 84 – Campos de temperatura, para os três combustíveis, considerando diversos CAD



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 85 – Campos de emissões no final das simulações (ponto de abertura da válvula de exaustão) para os três combustíveis



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

6 CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

6.1 Conclusões Gerais

Com a finalização deste trabalho, obteve-se uma metodologia detalhada e aprofundada para realização de simulações computacionais em motores de combustão interna de ignição por compressão empregando-se as ferramentas ANSYS Chemkin-Pro, para análise 0-D, e ANSYS/Forte, para análise 3D (trabalho pioneiro nessa área dentro do programa de pós graduação em engenharia mecânica da UNIFEI), além de desenvolver uma abordagem de otimização mono-objetivo para obtenção dos fatores pré-exponenciais das taxas das principais reações químicas presentes no processo de combustão do HVO, tanto puro quanto em uma mistura *dual-fuel* com biogás.

Foi realizada uma validação para a modelagem do motor Buffalo BFDE 10.0, que foi empregado nos testes experimentais do projeto ROTA 2030, com diesel puro a partir do desenvolvimento iniciado do zero, desde a modelagem em CAD da câmara de combustão até a modelagem CFD, empregando o modelo cinético de 35 espécies e 74 reações químicas já presente no banco de dados do ANSYS.

Durante esse processo, observou-se que para essa modelagem há uma grande quantidade de parâmetros e características, seja da modelagem do injetor, do *spray* do combustível primário ou da câmara de combustão, que não foram mensurados experimentalmente, necessitando assim da realização de uma análise 0-D através do *software* Chemkin-Pro (também da plataforma ANSYS) para estimação dos mesmos ou, ainda, a estimação a partir de dados presentes na literatura ou em tutoriais similares à análise realizada nesse trabalho.

Dessa forma, através da análise 0-D verificou-se que a duração da injeção (DOI) é um fator crucial para a validação das simulações, realizada pela curva de pressão no cilindro (medida experimentalmente), similar ao que é largamente feito em trabalhos da área. Notou-se que quanto menor o valor da DOI, maior será o pico de pressão e mais adiantada será a combustão. Além disso, de forma similar observou-se que o aumento da temperatura do combustível primário, também influenciará na curva de pressão no cilindro, mas de forma menos expressiva que para a DOI.

Pôde-se notar também que o modelo cinético empregado para a combustão influencia na predição das etapas de todo o processo analisado, na parte relativa à compressão, à predição do início da combustão, do pico de pressão no cilindro, das fases de combustão, da fase de expansão e da predição das emissões. Dentre as pesquisas realizadas, verificou-se que há diversos modelos simplificados, incluindo aquele empregado nesse trabalho, direcionados à modelagem de uma, ou alguma, das partes comentadas anteriormente, obtendo-se então resultados melhores validados em determinadas partes das curvas, como pode ser observado nos resultados obtidos e nas discussões realizadas no Capítulo 5, padrão que foi observado nas análises 0-D e 3D. Emprego de modelos cinéticos mais sofisticados, demandam maior tempo e custo computacionais, especialmente nas simulações 3D, o que fica como sugestão de trabalhos futuros, sendo o empregado aqui suficiente para o escopo deste trabalho.

A partir das simulações 3D realizadas no Forte, verificou-se ainda que há aumento na turbulência, conforme o pistão encaminha-se para o ponto morto superior, indicado pelo aumento na razão de *swirl*, na energia cinética turbulenta e na magnitude da velocidade dos fluidos presentes na câmara de combustão, que, além de ter seus maiores valores na região próxima ao PMS, possui uma distribuição mais heterogênea após esse ponto e conforme o pistão afasta-se desse ponto, comportamento também observado nos campos de temperatura e de emissões de CO₂, NO e NO₂. Ademais, para as emissões de NO₂ e CO₂, seus maiores valores estão no ponto de abertura da válvula de exaustão, enquanto que para as emissões de CO, NO, UHC e VOC seus máximos estão próximos ao PMS.

Em relação aos modelos cinéticos adaptados, notou-se que o procedimento empregado conseguiu obter valores para os fatores pré-exponenciais de forma satisfatória e com boa concordância, sendo validados com as curvas de pressão no cilindro obtidas experimentalmente durante o projeto ROTA 2030, indicando assim que esta é uma abordagem pertinente e de grande valia quando não há disponibilidade de modelos cinéticos prontos na literatura, como há para o diesel e para a gasolina, e também para utilização de redução de mecanismos complexos. Todavia, para sua obtenção teve-se um custo computacional elevado e, além disso, recomenda-se um estudo mais aprofundado no tema.

Através das simulações computacionais pode-se observar ao se comparar os três combustíveis utilizados, que a combustão do HVO, seja em modo *single* ou *dual-*

fuel, apresentou reduções nos picos de pressão e de liberação de calor, além de apresentar maior atraso do início da combustão, o que foi acentuado pela inserção e biogás na câmara de combustão, devido à sua substituição ao oxigênio e à presença de CO₂ na câmara de combustão. Além disso, observou-se uma grande redução nas emissões de óxidos de nitrogênio e de fuligem, indicando assim que a utilização do diesel renovável e, também, da combustão *dual* com biogás é de grande relevância nesse tema. Reduções nas frações molares de dióxido de carbono, monóxido e dióxido de nitrogênio para os três combustíveis analisados também foram observadas, no entanto, verificou-se aumento nas frações molares de monóxido de carbono.

As distribuições da magnitude de velocidade dos fluidos presentes na câmara de combustão apresentaram padrões similares para os três combustíveis, tendo seus maiores valores observados no PMS, indicando regiões de aceleração e de maior turbulência no movimento dos fluidos, sendo seguidas por distribuições mais heterogêneas, e com redução em seu valor conforme o movimento do pistão é avançado para o EVO. Em relação aos campos de temperatura, observou-se que o HVO possui uma distribuição espacial com menos regiões de alta temperatura. Além disso, a presença de biogás resultou em maior homogeneidade na distribuição de temperatura, com mais regiões de valores de alta temperatura, o que pode estar relacionado à presença do metano em sua composição. Todavia, conclusões mais aprofundadas acerca das distribuições espaciais de velocidade, temperatura e emissões são mais complexas, devido à carência de trabalhos na literatura para comparações.

Comenta-se ainda que, devido a grande gama de parâmetros que se deve modelar e descrever, há uma grande complexidade nas simulações computacionais em motores de combustão interna, especialmente na parte da modelagem do spray de combustível primário. Por sua vez, essa vasta quantidade de parâmetros também contribuiu para possíveis análises de diversos parâmetros que podem ser estudadas e trabalhos futuros, cujas sugestões serão apresentadas na seção seguinte.

Por fim, de modo geral, pode-se concluir que as simulações computacionais em MCI são ferramentas de grande relevância e podem contribuir positivamente com análises mais abrangentes, complexas de serem feitas experimentalmente, além de servirem de suporte para testes experimentais, podendo indicar melhores condições, misturas, limitações, otimização de parâmetros etc.

6.2 Sugestões de Trabalhos Futuros

As modelagens e simulações, sejam 0-D ou 3-D, realizadas nesse trabalho juntamente com o projeto ROTA 2030, abrem as portas para a realização de mais diversos trabalhos e análises na área de modelagem e simulação de MCI. A seguir, são apresentados alguns temas que podem ser desenvolvidos em trabalhos futuros, dando continuidade ao que já foi desenvolvido neste trabalho de mestrado.

Para aprimoramento da modelagem 3-D no Forte, sugere-se:

- Análise mais aprofundada dos parâmetros de injeção, como sua duração, quantidade de parcelas de combustível no spray e afins.
- Testes experimentais para definição do ângulo de cone e demais características de spray do diesel, do HVO e do Farnesano, para assim obter parâmetros mais específicos para cada combustível primário.
- Análises paramétricas diversas para verificar a influência de parâmetros na modelagem 3D do *spray* e da injeção, como: perfil de velocidade de injeção; constante de tempo do modelo KH; constante de comprimento do modelo RT; distribuição do tamanho das gotículas; localização da saída do bocal do injetor.
- Análise da variação das condições de contorno do problema: variação da temperatura das paredes; variação no modelo de transferência de calor; variação da rugosidade nas paredes; variação dos modelos de turbulência.
- Análise da variação dos parâmetros de inicialização da simulação: considerar efeitos da utilização de um sistema EGR; variar a temperatura inicial; variar os parâmetros de turbulência (energia cinética turbulenta e razão de *swirl*).
- Análise da influência da velocidade de rotação do motor.
- Análise das condições avançadas de controle de passo temporal, haja visto que o Forte utiliza uma malha temporal adaptativa.
- Análise da utilização de malhas adaptativas para a solução da parte de reações químicas, que podem reduzir o tempo computacional, a fim de se empregar modelos cinéticos com maior quantidade de espécies e reações químicas.
- Utilização do método dos momentos para modelar a predição da fuligem, além de calibração dos parâmetros de ambos os modelos Soot que o Forte utiliza.
- Utilização de outras malhas computacionais, bem como variação nos controles de malhas do Forte.

- Simulações *dual-fuel* com as demais vazões mássicas de injeção do biogás.
- Simulações utilizando outros combustíveis primários, como o Farnesano, e outras misturas *dual-fuel* com gases, como hidrogênio e gás-natural e, também, com etanol.

Em relação a parte de adaptação dos modelos cinéticos, sugere-se:

- Análise estatística mais aprofundada, juntamente com uma análise DOE (*Design Of Experiments*), o que poderia possibilitar uma melhor definição para os limites de busca das taxas de reações do modelo cinético adaptado e, inclusive, realizar uma otimização considerando todas as reações presentes no modelo D35sp, podendo assim minimizar o tempo computacional gasto nesse processo e maximizar as informações relevantes, obtendo assim as melhores combinações de variáveis a serem empregadas nesse processo adaptativo.
- Desenvolvimento de uma rotina computacional que considere nesse processo de adaptação o início da injeção real (SOI) e não a estática, como feito nesse trabalho, o atraso de ignição (ID – *Ignition Delay*, do inglês), o pico da taxa de liberação de calor e a formação de NO_x, por exemplo.
- Utilização desse processo para obtenção de um modelo cinético adaptado para a combustão do Farnesano puro, e para outras misturas *dual-fuel*.
- Análise considerando modelos cinéticos mais sofisticados, com outros *surrogates*, com maior quantidade de espécies e reações químicas, capazes de prever melhor a fase de combustão difusa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AATOLA, H. *et al.* Hydrotreated vegetable oil (HVO) as a renewable diesel fuel: Trade-off between NO_x, particulate emission, and fuel consumption of a heavy-duty engine. **SAE International Journal Engines**, v.1 n. 1, p. 1251-1262, 2008.
- ABANADES, S. *et al.* A critical review of biogas production and usage with legislations framework across the globe. **International Journal of Environmental Science and Technology**, v. 19, 2022, p. 3377-3400.
- ABIOGÁS. PROPOSTA DE PROGRAMA NACIONAL DO BIOGÁS E DO BIOMETANO (PNBB). Associação Brasileira do Biogás e do Biometano. São Paulo: ABiogás, 2021, 77 p. Disponível em: https://abiogas.org.br/wp-content/uploads/2021/01/PNBB_Versao_Final.pdf. Acesso em 27 mai 2022.
- ADHAVAN, K.; SATHISHKUMAR, S.; IBRAHIM, M. M. Numerical investigations on a biogas powered homogeneous charge compression ignition engine. **International Journal of Mechanical Engineering and Technology**, v. 9 (7), 2018, p. 1321-1330.
- AHMED, S. A. *et al.* Effects of CO₂ ratio in Biogas on Performance, combustion and Emissions of a Dual-Fuel Diesel Engine. **International Energy Journal**, v. 20, 2020, p. 15-38.
- ALVES, E.; INOUE, K.; BORGES, A. **Biodigestores: construção, operação e usos do biogás e do biofertilizante visando a sustentabilidade das propriedades rurais**. Anais do II Simpósio Brasileiro De Agropecuária Sustentável. Viçosa, MG, 23-25 setembro 2010.
- AMBARITA, H. Performance and emission characteristics of a small diesel engine run in dual-fuel (diesel-biogas) mode. **Case Studies in Thermal Engineering**, v. 10, 2017, p. 179-191.
- ANP. Proposta de Regulamentação do Diesel Verde. NOTA TÉCNICA Nº 4/2020/SBQ-CRP/SBQ/ANP-RJ, Brasília, 06 de março de 2020. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/analise-de-impacto-regulatorio-air/653252-proposta-de-regulamentacao-do-diesel-verde.pdf>. Acesso em 30 jan 2022.
- ANP. Resolução Nº 842, de 14 de maio de 2021. Disponível em: <https://www.in.gov.br/en/web/dou/-/resolucao-anp-n-842-de-14-de-maio-de-2021-320059616>. Acesso em 30 jan 2022.
- ANSYS, Inc. Chemkin-Pro Theory Manual – Release 2022 R1. USA, 2022.
- ANSYS, Inc. Forte Best Practices – Release 2022 R1. USA, 2022.
- ANSYS, Inc. Forte Theory Manual – Release 2022 R1. USA, 2022.

ANSYS, Inc. User's Guide – Release 2022 R1. USA, 2022.

ASHKEZARI, A.Z. *et al.* Emission and performance analysis of DI diesel engines fueled by biodiesel blends via CFD simulation of spray combustion and different spray breakup models: a numerical study. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 139, 2017, p. 2527-2539.

AYDIN, M.; SORUSBAY, C. **Simulation of Dual-Fuel Combustion in a Compression Ignition Engine**. Testing and Simulation Congress, AVL ATS, Automaker Media. [s.l.], november, 2015.

BALIJEPAI, R. *et al.* Numerical investigation of the effect of spray angle on emission characteristics of a diesel engine fueled with natural gas and diesel. **Energy Reports**, v. 7, p. 7273-7287, 2021.

BAARIK, D.; SATAPATHY, A. K.; MURUGAN, S. Combustion analysis of the diesel-biogas dual fuel direct injection diesel engine-the gas diesel engine. **International Journal of Ambient Energy**, v. 38 (3), 2015, p. 259-266.

BESCHKOV, V. Biogas Production: Evaluation and Possible Applications. In: Abomohra, A. E.; Salama, E. *Biogas - Basics, Integrated Approaches, and Case Studies*. London: IntechOpen, 2021.

BIOGASMAP. Painel dinâmico de plantas de biogás e biometano brasileiras. Disponível em: <https://biogasmap.cibiogas.org/>. Acesso em 27 mai 2022.

BOGGAVARAPU, P.; Ravikrishna, R. V. A review on atomization and sprays of biofuels for IC engine applications. **International journal of spray and combustion dynamics**, v.5, n. 2, p. 85-121, 2013.

BOHL, T. *et al.* Particulate number and NO_x trade-off comparisons between HVO and mineral diesel in HD applications. **Fuel**, v. 215, p. 90-101, 2018.

BOOT, M. *et al.* Spray Impingement in the Early Direct Injection Premixed Charge Compression Ignition Regime. **SAE Technical Paper**, n. 2010-01-1501, 2010,

BORTEL, I.; VÁVRA, J.; TAKÁTS, M. Effect of HVO fuel mixtures on emissions and performance of a passenger car size diesel engine. **Renewable Energy**, v. 140, p. 680-691, 2019.

BRUNETTI, F. Motores de combustão interna. Volume 1. São Paulo: Blucher, 2012, 553 p.

BRUNETTI, F. Motores de combustão interna. Volume 2. São Paulo: Blucher, 2012, 483 p.

BUFFALO MOTORES E ACESSÓRIOS. Site do fabricante com especificações do Motor BFDE 10.0 diesel (Filtro de ar a óleo), 2017. Disponível em: <https://www.buffalo.com.br/produto/33/motor-bfde-100-diesel-filtro-de-ar-oleo>. Acesso em 04 jul 2022.

- CÂMARA DOS DEPUTADOS. Projeto cria política para incentivar produção e uso de biogás. Artigo de Blog. Agência Câmara de Notícias, 2020. Disponível em: <https://www.camara.leg.br/noticias/657496-projeto-cria-politica-para-incentivar-producao-e-uso-de-biogas/>. Acesso em 27 mai 2022.
- CARVALHO JR., J. A. *et al.* Combustão Aplicada, 3^a. ed. Florianópolis: Editora UFSC, 2018, 372 p.
- CARVALHO JR., J. A.; LACAVA, P. T. Emissões em processos e combustão. São Paulo: Editora UNESP, 2003, 135 p.
- CAVALCANTI, C. J.S. *et al.* Simulation of the soybeann oil hydrotreating process for green diesel production, **Cleaner Chemical Engineering**, 2022, 100004.
- ÇENGEL, Y. A.; BOLES, M. A. Termodinâmica. 7.ed. Porto Alegre: AMGH, 2013, 1020 p.
- CHEN, S. K.; FLYNN, P. F. Development of a Single Cylinder Compression Ignition Research Engine. **SAE Technical Paper**, n. 650733, 1965.
- CHOWDARY, P. K. *et al.* Numerical analysis of C.I engine to control emissions using exhaust gas recirculation and advanced start of injection. **Alexandria Engineering Journal**, v. 55, n. 2, p. 1881-1891, 2016.
- CIBiogás. Panorama do biogás no Brasil 2021. Relatório Técnico nº 001/2022. CIBiogás (Centro Internacional de Energias Renováveis): CIBiogás, 2022, 20 p. Disponível em: <https://materiais.cibiogas.org/download-panorama-do-biogas-no-brasil-2021>. Acesso em 27 mai 2022.
- CNN Brasil. Brasil decide manter mistura 10% de biodiesel no diesel para todo o ano de 2022. Artigo de blog, 2021. Disponível em: <https://www.cnnbrasil.com.br/business/brasil-decide-manter-mistura-10-de-biodiesel-no-diesel-para-todo-o-ano-de-2022/>. Acesso em 29 jan 2022.
- CORRÊA, B. RS aposta em biometano para ampliar oferta de gás. Artigo de blog, 2020. Disponível em: <https://www.sema.rs.gov.br/rs-aposta-em-biometano-para-ampliar-oferta-de-gas>. Acesso em 26 mai 2022.
- CURRAN, H.J. *et al.* A Comprehensive Modeling Study of N-Heptane Oxidation. **Combustion and Flame**, 114, 1998, p.149-177.
- DA COSTA, R. B. R. Estudo experimental da tecnologia *dual-fuel* em motor de combustão interna utilizando biogás, GNV e etanol. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica), Universidade Federal de Minas Gerais – Escola de Engenharia. Belo Horizonte, 2017, 156 f.
- DA COSTA, R. B. R. Estudo experimental de um motor de ignição por compressão utilizando diesel renovável da cana-de-açúcar (Farnesano) e biodiesel de óleo residual de cozinha (WCO). Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica), Universidade Federal de Itajubá. Itajubá, 2021, 156 f.

- DA COSTA, R. B. R. *et al.* Experimental assessment of renewable diesel fuels (HVO/Farnesane) and bioethanol on dual-fuel mode. **Energy Conversion and Manegement**, 258, 115554, 2022.
- DA COSTA, R. B. R. *et al.* Experimental investigation on the potential of biogas/ethanol dual-fuel spark-ignition engine for power generation: Combustion, performance and pollutant emission analysis. **Applied Energy**, v. 261, 2020, 114438.
- DA SILVA, F. J. Motor de combustão interna dual operando com diesel, biodiesel e gás natural: análises de desempenho e emissões. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos), Universidade Federal de Campina Grande – Centro de Ciência e Tecnologia. Campina Grande, 2014, 205 f.
- DAMYANOVA, S.; BESCHKOV, V. Biogas as a Source of Energy and Chemicals. In: Beschkov, V. *Biorefinery Concepts, Energy and Products*. London: IntechOpen, 2020.
- DATA SEBRAE – BIOGÁS. Biblioteca de legislação do biogás. Disponível em: <https://datasebrae.com.br/biblioteca-legislacao-biogas/>. Acesso em: 28 mai 2022.
- DATTA, A.; MANDAL, B. K. Impact of alcohol addition to diesel on the performance combustion and emissions of a compression ignition engine. **Applied Thermal Engineering**, v. 98, p. 670–682, April 2016.
- DE CARVALHO, C. H. R. Emissões relativas de poluentes do transporte motorizado de passageiros nos grandes centros urbanos brasileiros. Texto para discussão, Instituto de Pesquisa Econômica Aplicada (IPEA), Brasília, 2011, 39 p.
- DE ROBBIO, R. *et al.* CFD Study and Experimental Validation of a Dual Fuel Engine: Effect of Engine Speed. **Energies**, v. 14, n. 14, 4307, 2021.
- DE ROBBIO, R.; CAMERETTI, M.C.; TUCCILLO, R. Ignition and combustion modelling in a dual fuel diesel engine. **Propulsion and Power Research**, v.9, n.2, 2020, p. 116-131.
- DEHERI, C. *et al.* A review on performance of biogas and hydrogen on diesel engine in dual fuel mode. **Fuel**, v. 260, 2020, 116337.
- DELPHI. Worldwide emissions standards: Heavy duty and off-highway vehicles. Relatório, Delphi, Michigan, 2012. Disponível em: <https://pdf.directindustry.com/pdf/delphi-power-train/worldwide-emissions-standards-heavy-duty-off-highway-vehicles/54988-718904.html>. Acesso em 14 jun 2022.
- DEMPSEY, A. B. *et al.* Evaluation of the Two-Step Hiroyasu Soot Model over a Broad Range of Diesel Combustion Systems. **SAE Technical Paper**, n. 2018-01-0242, 2018.

- DIMITRIADIS, A. *et al.* Evaluation of a hydrotreated vegetable oil (HVO) and effects on emissions of a passenger car diesel engine. **Frontiers in Mechanical Engineering**, v. 4, Article 7, 2018.
- DIMITRIADIS, A. Theoretical and experimental investigation of the effects of hydrogenated vegetable oils on the functional characteristics and emission controls of internal combustion engines. PhD Thesis (Doctor of Philosophy in Department of Mechanical Engineering), Aristotle University of Thessaloniki. Thessaloniki, 2021, 150 f.
- EC (European Commission). European Alternative Fuels Observatory, Advanced Biofuels, Hydrotreated Vegetable Oils (HVO), Artigo de site, 2019. Disponível em: <https://www.eafo.eu/alternative-fuels/advanced-biofuels/hvo>. Acesso em 30 jan 2022.
- ELZAHABY, A. M. *et al.* Kinetic modeling and experimental study on the combustion, performance and emission characteristics of a PCCI engine fueled with ethanol-diesel blends. **Egyptian Journal of Petroleum**, v. 27 (4), p. 927-937, 2018.
- EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA (Brasil). *Balanço Energético Nacional 2022: Ano base 2021*. Empresa de Pesquisa Energética. Rio de Janeiro: EPE, 2022.
- ERDIWANSYAH, L, A. M. *et al.* **Engine modelling of a single cylinder diesel engine fuelled by diesel-methanol blend**. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, v. 506 (2019), 1st South Aceh International Conference on Engineering and Technology (SAICOET), 8-9 december 2018, Politeknik Aceh Selatan Campus, Indonesia.
- FERGUSON, C. R.; KIRKPATRICK, A. T. Internal combustion engines: applied thermosciences. 3rd ed. Noida: Thomson Digital, 2016, 459 p.
- FREITAS, F. F. *et al.* The Brazilian market of distributed biogas generation: Overview, technological development and case study. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 101, 2019, p. 146-157.
- GA, B. V.; THAI, P.Q. Soot Emission Reduction in a Biogas-DME Hybrid Dual-Fuel Engine. **Applied Sciences**, v. 10 (10), 3416, 2020.
- GANJI, P.R. *et al.* Design of piston bowl geometry for better combustion in direct-injection compression ignition engine. **Sādhanā**, 43: 92, 2018.
- GHAREHGHANI, A.; MIRSALIM, S. M.; JAZAYERI, S. A. Numerical and experimental investigation of combustion and knock in a dual fuel gas/diesel compression ignition engine. **Journal of Combustion**, vol. 2012, 2012, 10 p.
- GIACOSA, D. Motores endotermicos. 3.ed. Dossat, 1979, 758 p.
- GIFIMAGE. Animação de motor diesel, 2017. Disponível em: <https://gifimage.net/wp-content/uploads/2017/10/motor-diesel-gif.gif>. Acesso em 10 nov 2021.

- GREENEA. Greenea horizon 2030 Which investments will see the light in the biofuel industry. Artigo de site, 2021. Disponível em: <https://www.greenea.com/wp-content/uploads/2021/01/Greenea-Horizon-2030-Which-investments-will-see-the-light-in-the-biofuel-industry-1.pdf>. Acesso em 19 fev 2022.
- HAN, Z.; REITZ, R. D. Turbulence Modeling of Internal Combustion Engines Using RNG k- ϵ Models. **Combustion Science and Technology**, v. 106, 1995, p. 267-295.
- HANAFI, H. *et al.* **Numerical modeling on homogeneous charge compression ignition combustion engine fueled by diesel-ethanol blends**. MATEC Web Conf., 74 (00037), 2016.
- HEYWOOD, J. B. Internal combustion engines. 2nd ed. New York: McGraw-Hill Education, 2018, 1721 p.
- HILBERS, T. J. *et al.* Green diesel from hydrotreated vegetable oil process design study. **Chemical Engineering Technology**, 38 (4), 2015, p. 1-8.
- HIROYASU, H.; KADOTA, T. Models for Combustion and Formation of Nitric Oxide and Soot in Direct Injection Diesel Engines. **SAE International Technical Paper**, n. 760129, 1976.
- HONKANEN, M.; DÖRR, S. Cleaner Future by new diesel?. Workshop Modernisation Danube Vessels, NESTE, 2019. Disponível em: https://www.interreg-danube.eu/uploads/media/approved_project_public/0001/39/d47c6ca5ecf9bdf82add70b094362c1af3e29e7.pdf. Acesso em 19 fev 2022.
- HUANG, Y.; HONG, G.; HUANG, R. Numerical investigation to the dual-fuel spray combustion process in an ethanol direct injection plus gasoline port injection (EDI+GPI) engine. **Energy Conversion and Management**, v. 92, p. 275-286, 2015.
- IBGE. Pesquisa sobre a Frota de veículos no Brasil. Amostras para todos os anos compreendidos entre 2006 e 2021. Disponível em: <https://cidades.ibge.gov.br/brasil/pesquisa/22/28120>. Acesso em 22 out 2022.
- IGONI, A. H. Designs of anaerobic digesters for producing biogas from municipal solid-waste. **Applied Energy**, v. 85 (6), 2008, p. 430-438.
- JAMALI, A.; NALIM, M. R. **Numerical simulation of dual-fuel compression-ignition engine in part-load operating condition with double injection**. Proceedings of the ASME 2016 Internal Combustion Engine Fall Technical Conference. Greenville, SC, USA, October 9-12, 2016.
- KARIM, G. A. Dual-fuel diesel engines. Boca Raton: CRC Press, 2015, 288 p.
- KARIMI, M. *et al.* Numerical investigation on hydrogen-diesel dual-fuel engine improvements by oxygen enrichment. **International Journal of Hydrogen Energy**, In Press, 2022.

- KARUPPA RAJ, R. T.; MANIMARAN, R. Effect of Swirl in a Constant Speed DI Diesel Engine using Computational Fluid Dynamics. **CFD Letters**, v. 4, n. 4, p. 214-224, 2012.
- KATTA, V. R.; AGGARWAL, S. K.; ROQUEMORE, W. M. Evaluation of chemical-kinetics models for n-heptane combustion using a multidimensional CFD code. **Fuel**, v. 93, 2012, p. 339-350.
- KOKJOHN, S. L. *et al.* **Modeling Charge Preparation and Combustion in Diesel Fuel, Ethanol, and Dual-Fuel PCCI Engines**. ILASS-Americas 22nd Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems: Cincinnati, OH, May 2010.
- KOTEN, H.; YILMAZ, M.; GUL, M. Z. Compressed Biogas-Diesel Dual-Fuel Engine Optimization Study for Ultralow Emission. **Advances in Mechanical Engineering**, v. 2014, Article ID 571063, 2014.
- KULESHOV, A.S. Use of Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Simulation and Optimization of Performance and Emissions of Engines with Multiple Injection. **SAE Technical Paper**, n. 2006-01-1385, 2006.
- LAKSHMINARAYANAN, P.A.; AGHAV, Y. V. **Modelling Diesel Combustion: Mechanical Engineering Series**, Springer Science, 2012.
- LASOCKI, J., BEDNARSKI, M.; SIKORA, M. **Simulation of ammonia combustion in dual-fuel compression ignition engine**. 2nd International Conference on the Sustainable Energy and Environmental Development – IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science, 214, 2019.
- LI, T. *et al.* Characteristics of non-evaporating, evaporating and burning sprays of hydrous ethanol diesel emulsified fuels, **Fuel**, v. 191, p. 251-265, 2017.
- LNL, Lawrence Livermore National Laboratory. n-Heptane Detailed Mechanism Version 3, 2022. Disponível em: <https://combustion.llnl.gov/mechanisms/alkanes/n-heptane-detailed-mechanism-version-3>. Acesso em 13 jul 2022.
- MA, J. *et al.* Numerical Simulation of the Influence of CO₂ on the Combustion Characteristics and NO_x of Biogas. **Frontiers in Energy Research**, v. 9, Article 811037, 2022.
- MAGHBOULI, A. *et al.* Numerical study of combustion and emission characteristics of dual-fuel engines using 3D-CFD models coupled with chemical kinetics. **Fuel**, v. 106, p. 98-105, 2013.
- MANSOURI, S.; BAKHSHAN, Y. Studies of NO_x, CO, soot formation and oxidation from a direct injection stratified-charge engine using the k- ϵ turbulence model. Proceedings of The Institution of Mechanical Engineers, Part D: **Journal of Automobile Engineering**, v. 215, n. 1, p. 95-104, 2001.

- MARTINS, C. A.; FERREIRA, M. A. **Considerações sobre a formação de NO_x na combustão**. VI Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (CONEM), Campina Grande - PB: 18 a 21 de agosto de 2010.
- MATHIAS, M. C. P. P.; MATHIAS, J. F. C. M. Biogas in Brazil: A Governmental Agenda. **Journal of Energy and Power Engineering**, v. 9, 2015, p. 1-15.
- MATTARELLI, E.; RINALDINI, C. A.; GOLOVITCHEV, V. I. CFD-3D analysis of a light duty dual fuel (diesel/natural gas) combustion engine. **Energy Procedia**, v. 45, 2014, p. 929–937.
- MERKER, G. *et al.* **Combustion Engines Development: Mixture Formation, Combustion, Emissions and Simulation**. Berlin: Springer, 2012, 642 p.
- METGHALCHI, M.; KECK, J.C. Burning Velocities of Mixtures of Air with Methanol, Isooctane, and Indolene at High Pressure and Temperature. **Combustion and Flame**, v. 48, 1982, p. 191-210.
- MILLO, F. *et al.* Mixture formation and combustion process analysis of an innovative diesel piston bowl design through the synergetic application of numerical and optical techniques. **Fuel**, v. 309, 122144, 2022.
- MONDO K. *et al.* Impact of Multi-Component Surrogates on the Performances, Pollutants, and Exergy of IC Engines. **Entropy**, v. 24, n. 5, 671, 2022
- MORAN, M. J.; SHAPIRO, H. N. Fundamentals of engineering thermodynamics: SI version, 5th ed. England: John Wiley & Sons, 2006, 831 p.
- NAZEMI, M.; SHAHBAKHTI, M. Modeling and analysis of fuel injection parameters for combustion and performance of an RCCI engine. **Applied Energy**, v. 165, p. 135-150, 2016.
- OLIVEIRA, T. L. Análise energética, exergética e experimental em um motor de combustão interna usando como combustível os fluidos do processo de pirólise assistida por micro-ondas”. Tese (Doutorado em Engenharia de Materiais), Universidade Federal de Ouro Preto – REDEMAT, 2018, 184 f.
- OWCZUK, M. *et al.* Evaluation of using biogas to supply the dual fuel diesel engine of an agricultural tractor. **Energies**, v. 12, 71, 2019, p. 1-12
- PATEL, A.; KONG, S.; REITZ, R. D. Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations. **SAE Technical Paper**, n. 2004-01-0558, 2004.
- PEREIRA, J. L. J. *et al.* Lichtenberg Algorithm: A Novel Hybrid PHYSICS-Based Meta-Heuristic For Global Optimization. **Expert systems with applications**, v. 170, 2021, 114522.
- PIRJOLA, L. *et al.* Exhaust emissions of non-road mobile machine: Real-world and laboratory studies with diesel and HVO fuels. **Fuel**, v. 202, p. 154-164, 2017.

- PLENGSA-ARD, C.; KAEWBUMRUNG, M. CFD modelling wall heat transfer inside a combustion chamber using ANSYS forte. **IOP Conference Series: Materials Science and Engineering**, v. 297, n. 012036, 2018
- PRAPTIJANTO, A.; MUHARAM, A.; NUR, A.; PUTRASARI, Y. Effect of ethanol percentage for diesel engine performance using virtual engine simulation tool. **Energy Procedia**, 68 (2nd International Conference on Sustainable Energy Engineering and Application, ICSEEA 2014 edition), 2015, p. 345-354.
- PRASAD, B.V.V.S.U. *et al.* High swirl-inducing piston bowls in small diesel engines for emission reduction. **Applied Energy**, v. 88, n. 7, p. 2355-2367, 2011.
- PULKRABEK, W. W. Engineering fundamentals of the internal combustion engine. Harlow: Pearson, 2013.
- RAEIE, N.; EMAMI, S.; SADAGHIYANI, O. Effects of injection timing, before and after top dead center on the propulsion and power in a diesel engine. **Propulsion and Power Research**, v. 3 (2), 2014, p. 59-67
- RAHIMI, A.; FATEHIFAR, E.; SARAY, R. K. Development of an optimized chemical kinetic mechanism for homogeneous charge compression ignition combustion of a fuel blend of n-heptane and natural gas using a genetic algorithm. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: **Journal of Automobile Engineering**, v. 224, n. 9, p. 1141-1159, 2010.
- RAKOPOULOS, C.D. *et al.* Multi-zone modeling of combustion and emissions formation in DI diesel engine operating on ethanol–diesel fuel blends. **Energy Conversion and Management**, v.49, 2008, p. 625–643.
- REIS, L. Biogás no Brasil, história e perspectiva de futuro. Artigo de blog, 2020. Disponível em: <https://cibiogas.org/en/blog-post/biogas-no-brasil-historia-e-perspectiva-de-futuro/>. Acesso em 27 mai 2022.
- RENOVABIO. Propostas das instituições presentes na reunião de construção do renovabio biocombustíveis biogás e biometano. Documento do antigo ministério de minas e energia [s.d.]. Disponível em: http://antigo.mme.gov.br/c/document_library/get_file?uuid=87ed2d4e-5a4a-db52-5d0b-737d2662ac9c&groupId=36224. Acesso em 27 mai 2022.
- REŞİTOĞLU, I. A.; ALTINIŞIK, K.; KESKIN, A. The pollutant emissions from diesel-engine vehicles and exhaust aftertreatment systems. **Clean Technologies and Environmental policy**, v. 17, 2015, p. 15-27.
- RIBEIRO, M.D. *et al.* Effect of different parameters on mixture formation and flow field in simulations of an evaporative spray injection test case. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering**, v. 40, 252, 2018.

- RIMKUS, A.; STRAVINSKAS, S.; MATIJOŠIUS, J. Comparative Study on the Energetic and Ecologic Parameters of Dual Fuels (Diesel–NG and HVO–Biogas) and Conventional Diesel Fuel in a CI Engine. **Applied Sciences**, 10, 359, 2020.
- SÁNCHEZ, G. F. G.; VELASCO, J. L. C.; GUERRERO, A. C. Modelado de la combustión en motores Diésel: revisión del estado del arte. **Revista ION**, v. 26(1), p. 41-54, 2013.
- SANCHEZ, Y. O.; FLOREZ, E. G.; MESA, D. H. Analysis of the Influence of Droplet Breakup Time using Kelvin-Helmholtz Model, on the Diesel Spray Formation, Evaporation and Combustion. **International journal of automotive and mechanical engineering**, v. 18 (4), p. 9271-9283, 2021.
- SENER, R *et al.* Influence of piston bowl geometry on combustion and emission characteristics. **Journal of power and energy**, v. 233 (5), p. 576-587, 2019.
- SHEPEL, O. *et al.* Research of Parameters of a Compression Ignition Engine Using Various Fuel Mixtures of Hydrotreated Vegetable Oil (HVO) and Fatty Acid Esters (FAE). **Energies**, 14, 2077, 2021.
- SIMSEK, D. *et al.* Model analysis of the effect of ethanol blended diesel fuels in diesel engines on ignition delay and combustion. **International Journal of Scientific Research in Science and Technology**, v. 3 (4), p. 47-54, 2017.
- SODRÉ, J. R. *et al.* Simulation of a Diesel Engine Operating with Ethanol to Reduce Pollutant Emissions. **Chemical Engineering Transactions**, v. 39, p. 1165-1170, 2014.
- SONDORS, K. *et al.* **Comparison of car performance using HVO fuel and diesel fuel**. Proceedings of the 20th International Scientific Conference on Engineering for Rural Development. Jelgava, LATVIA, May 26-28, 2021.
- SÖNNICHSEN, N. Global biogas production 2000-2019. Site com dados estatísticos. Disponível em: <https://www.statista.com/statistics/481791/biogas-production-worldwide/>. Acesso em 27 mai 2022.
- SOUZA, A. V. D. O que é HVO? Por que é chamado de diesel verde?. Artigo de Blog, 2020. Disponível em: <https://profissaobiotec.com.br/hvo-chamado-diesel-verde/>. Acesso em 19 fev 2022.
- SUAREZ-BERTOIA, R. *et al.* Impact of HVO blends on modern diesel passenger cars emissions during real world operation. **Fuel**, v. 235, p. 1427-1435, 2019.
- SUBRAMANIAN, K. A. Biofueled reciprocating internal combustion engines. Boca Raton: CRC Press, 2017, 261 p.
- TAIB, N. M. *et al.* Simulation study of combustion characteristics of diesel-ethanol-palm oil methyl ester blends in diesel engine. **Journal of Advanced Research in Fluid Mechanics and Thermal Sciences**, v.44, n.1, 2018, p. 149-156.

- TAY, K. L. *et al.* Development of a Highly Compact and Robust Chemical Reaction Mechanism for Unsaturated Furan Oxidation in Internal Combustion Engines via a Multiobjective Genetic Algorithm and Generalized Polynomial Chaos. **Energy & fuels**, v. 36, 2020, p. 936-948.
- TIRA, H. S. *et al.* The study of simulated biogas on combustion and emission characteristics in compression ignition engines. **Combustion Engines**, v. 141 (2), 2010, p. 47-55.
- TONGCHIT, S.; THANANCHAI, P.; ASSAWIN, R. A Comparative Study of a used 4-Stroke Motorcycle Engine Performance Using E85 and Gasoline 91. **Proceedings of 7th International Conference on Automotive Engineering (ICAE-7)**, Bangkok, Thailand March 28 – April 1, 2011.
- TURNES, S. R. Combustão: Conceitos e Aplicações, 3 ed. Porto Alegre: AMG, 2013, 404 p.
- TUTAK, W.; JAMROZIK, A. Generator gas as a fuel to power a diesel engine. **Thermal Science**, v. 18, n. 1, p. 205-216, 2013.
- TUTAK, W.; JAMROZIK, A.; BERECHKY, Á.; LUKACS, K. Effects of injection timing of diesel fuel on performance and emission of dual fuel diesel engine powered by diesel/E85 fuels. **Transport**, v. 33, n. 3, p. 633-646, 2018.
- TUTAK, W.; SZWAJA, S. The effect of methanol-diesel combustion on performance and emissions of a direct injection diesel engine. **Journal of KONES Powertrain and Transport**, v. 22, n. 2, 2015.
- UNDALE, G. R.; SHAIKH, S. S. Investigation on performance and emission characteristics of biogas-diesel dual fuel engine based on AVL BOOST simulation. **Journal of Emerging Technologies and Innovative Research**, v. 6, n. 4, p. 695-704, 2019.
- VERIANSYAH, B. *et al.* Production of renewable diesel by hydroprocessing of soybean oil: Effect of catalysts, **Fuel**, v. 94, 2012, p. 578-585.
- VIBRA ENERGIA. Vibra e Brasil BioFuels (BBF) celebram contrato de compra e venda de diesel verde. Artigo de site, 2021. Disponível em: <https://www.vibraenergia.com.br/sites/default/files/2021-11/release-vibra-brasil-bioFuel-BBF-celebram-contrato-compra-venda-diesel-verde.pdf>. Acesso em 30 jan 2022.
- WANG, D. *et al.* Numerical study on the wall-impinging diesel spray mixture formation, ignition, and combustion characteristics in the cylinder under cold-start conditions of a diesel engine. **Fuel**, v. 317, 123518, 2022.
- WEI, H. *et al.* Influence of the accelerating operation mechanism on the combustion noise in DI-diesel engines. **International Journal of Automotive Technology**, v. 13, n. 3, p. 373-388, 2012.

- WEI, L. *et al.* Input parameter tuning of 3D biodiesel engine simulation using parallel surrogate optimization algorithm. **Computers and Chemical Engineering**, v. 145 (107180), 2021.
- WEI, S. *et al.* Numerical analysis on the effect of swirl ratios on swirl chamber combustion system of DI diesel engines. **Energy Conversion and Management**, v. 75, 2013, p. 184-190.
- WU, S. *et al.* Development of a compact and robust kinetic mechanism for furan group biofuels combustion in internal combustion engines. **Fuel**, v. 298, 2021, 120824.
- XIN, Q. Fundamentals of dynamic and static diesel engine system designs. Chapter 4. Book: Diesel Engine System Design. Woodhead Publishing: 2013, p. 299-347.
- YOUSEFI, A. *et al.* Performance and emissions of a dual-fuel pilot diesel ignition engine operating on various premixed fuels. **Energy Conversion and Management**, v. 106, p. 322-336, 2015.
- YU, W.; ZHAO, F. Formulating of model-based surrogates of jet fuel and diesel fuel by an intelligent methodology with uncertainties analysis. **Fuel**, v. 268, 2020, 117393.
- ZHANG, B. *et al.* Numerical Investigation of Dual Fuel Diesel-CNG Combustion on Engine Performance and Emission. **SAE Technical Paper**, n. 2015-01-0009, 2015,
- ZHANG, T.; YANG, Y.; XIE, D. Insights into the production potential and trends of China's rural biogas. **International Journal of Energy Research**, v. 39 (8), p. 1068-1082, 2015.
- ZHANG, W. *et al.* A diesel/natural gas dual fuel mechanism constructed to reveal combustion and emission characteristics. **Energy**, v. 179, p. 59-75, 2019.
- ZHOU, D. Z. *et al.* Application of CFD-chemical kinetics approach in detecting RCCI engine knocking fuelled with biodiesel/methanol. **Applied Energy**, v. 145, p. 255-264, 2015.

ANEXO A – MECANISMO DA REAÇÃO DO DIESEL PARA 35 ESPÉCIES

Este anexo apresenta as reações, bem como os parâmetros da lei de Arrhenius, vide Eq. (68), para o modelo de oxidação do Diesel considerando 1 componente, 35 espécies e 74 reações químicas, denominado D35sp no texto.

elements

h c o n
end

species

nc7h16 o2 n2 co2 h2o co h2 oh h2o2 ho2 h o
ch3o ch2o hco ch2 ch3 ch4 c2h2 c2h3 c2h4 c2h5 c3h4 c3h5 c3h6 c3h7
c7h15-2 c7h15o2 c7ket12 c5h11co
n n2o no no2
soot nox
end

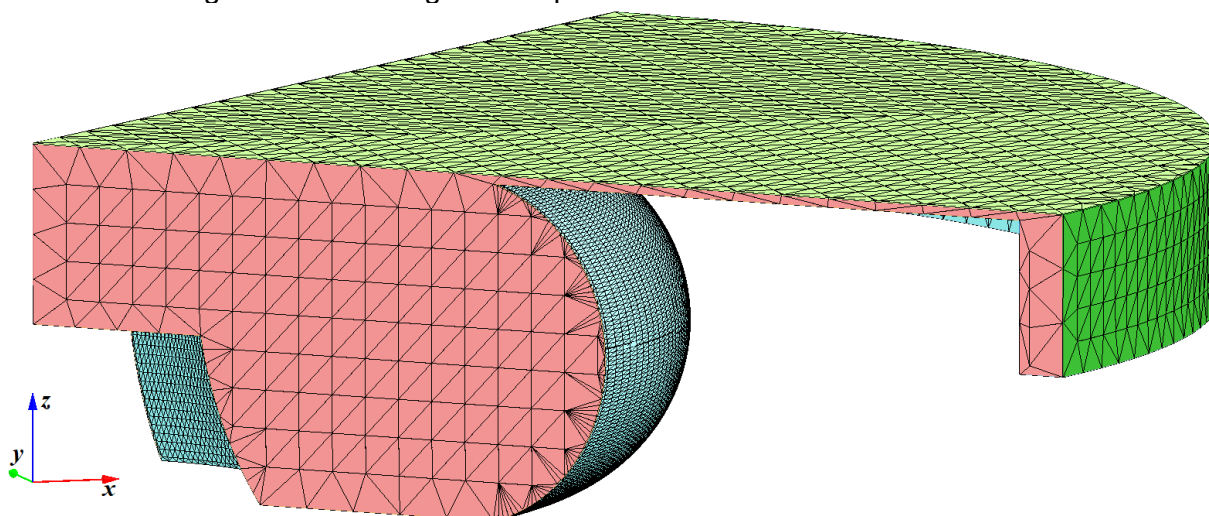
REACTIONS CONSIDERED	(k = A T**b exp(-E/RT))		
	A	b	E
1. nc7h16+h=c7h15-2+h2	4.38E+07	2.0	4760.0
2. nc7h16+oh=c7h15-2+h2o	9.70E+09	1.3	1690.0
3. nc7h16+ho2=c7h15-2+h2o2	1.65E+13	0.0	16950.0
4. nc7h16+o2=c7h15-2+ho2	2.00E+15	0.0	47380.0
5. c7h15-2+o2=c7h15o2	1.56E+12	0.0	0.0
6. c7h15o2+o2=c7ket12+oh	4.50E+14	0.0	18232.7
7. c7ket12=c5h11co+ch2o+oh	9.53E+14	0.0	41100.0
8. c5h11co=c2h4+c3h7+co	9.84E+15	0.0	40200.0
9. c7h15-2=c2h5+c2h4+c3h6	7.04E+14	0.0	34600.0
10. c3h7=c2h4+ch3	9.60E+13	0.0	30950.0
11. c3h7=c3h6+h	1.25E+14	0.0	36900.0
12. c3h6+ch3=c3h5+ch4	9.00E+12	0.0	8480.0
13. c3h5+o2=c3h4+ho2	6.00E+11	0.0	10000.0
14. c3h4+oh=c2h3+ch2o	1.00E+12	0.0	0.0
15. c3h4+oh=c2h4+hco	1.00E+12	0.0	0.0
16. ch3+ho2=ch3o+oh	5.00E+13	0.0	0.0
17. ch3+oh=ch2+h2o	7.50E+06	2.0	5000.0
18. ch2+oh=ch2o+h	2.50E+13	0.0	0.0
19. ch2+o2=hco+oh	4.30E+10	0.0	-500.0
20. ch2+o2=co2+h2	6.90E+11	0.0	500.0
21. ch2+o2=co+h2o	2.00E+10	0.0	-1000.0
22. ch2+o2=ch2o+o	5.00E+13	0.0	9000.0
23. ch2+o2=co2+h+h	1.60E+12	0.0	1000.0
24. ch2+o2=co+oh+h	8.60E+10	0.0	-500.0
25. ch3o+co=ch3+co2	1.57E+14	0.0	11800.0
26. co+oh=co2+h	8.99E+07	1.3	-758.0
27. o+oh=o2+h	4.00E+14	-0.5	0.0
28. h+ho2=oh+oh	1.70E+14	0.0	875.0
29. oh+oh=o+h2o	6.00E+08	1.3	0.0

30.	$\text{h}+\text{o}_2+\text{m}=\text{ho}_2+\text{m}$			3.60E+17	-0.7	0.0
	h2o	Enhanced by	2.100E+01			
	co2	Enhanced by	5.000E+00			
	h2	Enhanced by	3.300E+00			
	co	Enhanced by	2.000E+00			
32.	$\text{h}_2+\text{oh}=\text{h}_2\text{o}+\text{h}$			1.17E+09	1.3	3626.0
33.	$\text{ho}_2+\text{ho}_2=\text{h}_2\text{o}_2+\text{o}_2$			3.00E+12	0.0	0.0
34.	$\text{ch}_2\text{o}+\text{oh}=\text{hco}+\text{h}_2\text{o}$			5.56E+10	1.1	-76.5
35.	$\text{ch}_2\text{o}+\text{ho}_2=\text{hco}+\text{h}_2\text{o}_2$			3.00E+12	0.0	8000.0
36.	$\text{hco}+\text{o}_2=\text{ho}_2+\text{co}$			3.30E+13	-0.4	0.0
37.	$\text{hco}+\text{m}=\text{h}+\text{co}+\text{m}$			1.59E+18	0.9	56712.3
38.	$\text{ch}_3+\text{ch}_3\text{o}=\text{ch}_4+\text{ch}_2\text{o}$			4.30E+14	0.0	0.0
39.	$\text{c}_2\text{h}_4+\text{oh}=\text{ch}_2\text{o}+\text{ch}_3$			6.00E+13	0.0	960.0
40.	$\text{c}_2\text{h}_4+\text{oh}=\text{c}_2\text{h}_3+\text{h}_2\text{o}$			8.02E+13	0.0	5955.0
41.	$\text{c}_2\text{h}_3+\text{o}_2=\text{ch}_2\text{o}+\text{hco}$			4.00E+12	0.0	-250.0
42.	$\text{c}_2\text{h}_3+\text{hco}=\text{c}_2\text{h}_4+\text{co}$			6.03E+13	0.0	0.0
43.	$\text{c}_2\text{h}_5+\text{o}_2=\text{c}_2\text{h}_4+\text{ho}_2$			2.00E+10	0.0	-2200.0
44.	$\text{ch}_4+\text{o}_2=\text{ch}_3+\text{ho}_2$			7.90E+13	0.0	56000.0
45.	$\text{oh}+\text{ho}_2=\text{h}_2\text{o}+\text{o}_2$			7.50E+12	0.0	0.0
46.	$\text{ch}_3+\text{o}_2=\text{ch}_2\text{o}+\text{oh}$			3.80E+11	0.0	9000.0
47.	$\text{ch}_4+\text{h}=\text{ch}_3+\text{h}_2$			6.60E+08	1.6	10840.0
48.	$\text{ch}_4+\text{oh}=\text{ch}_3+\text{h}_2\text{o}$			1.60E+06	2.1	2460.0
49.	$\text{ch}_4+\text{o}=\text{ch}_3+\text{oh}$			1.02E+09	1.5	8604.0
50.	$\text{ch}_4+\text{ho}_2=\text{ch}_3+\text{h}_2\text{o}_2$			9.00E+11	0.0	18700.0
51.	$\text{ch}_4+\text{ch}_2=\text{ch}_3+\text{ch}_3$			4.00E+12	0.0	-570.0
52.	$\text{c}_3\text{h}_6=\text{c}_2\text{h}_3+\text{ch}_3$			3.15E+15	0.0	85500.0
53.	$\text{ch}_2+\text{ch}_2=\text{c}_2\text{h}_2+\text{h}_2$			1.20E+13	0.0	800.0
54.	$\text{ch}_2+\text{ch}_2=\text{c}_2\text{h}_2+\text{h}+\text{h}$			1.20E+14	0.0	800.0
55.	$\text{c}_2\text{h}_4+\text{m}=\text{c}_2\text{h}_2+\text{h}_2+\text{m}$			1.50E+15	0.0	55800.0
56.	$\text{c}_2\text{h}_2+\text{o}_2=\text{hco}+\text{hco}$			4.00E+12	0.0	28000.0
57.	$\text{c}_2\text{h}_2+\text{o}=\text{ch}_2+\text{co}$			1.02E+07	2.0	1900.0
58.	$\text{c}_2\text{h}_2+\text{h}+\text{m}=\text{c}_2\text{h}_3+\text{m}$			5.54E+12	0.0	2410.0
59.	$\text{c}_2\text{h}_3+\text{h}=\text{c}_2\text{h}_2+\text{h}_2$			4.00E+13	0.0	0.0
60.	$\text{c}_2\text{h}_3+\text{oh}=\text{c}_2\text{h}_2+\text{h}_2\text{o}$			3.00E+13	0.0	0.0
61.	$\text{c}_2\text{h}_3+\text{ch}_2=\text{c}_2\text{h}_2+\text{ch}_3$			3.00E+13	0.0	0.0
62.	$\text{c}_2\text{h}_3+\text{c}_2\text{h}_3=\text{c}_2\text{h}_2+\text{c}_2\text{h}_4$			1.45E+13	0.0	0.0
63.	$\text{c}_2\text{h}_3+\text{o}=\text{c}_2\text{h}_2+\text{oh}$			1.00E+13	0.0	0.0
64.	$\text{c}_2\text{h}_2+\text{oh}=\text{ch}_3+\text{co}$			4.83E-04	4.0	-2000.0
65.	$\text{c}_2\text{h}_3=\text{c}_2\text{h}_2+\text{h}$			4.60E+40	-8.8	46200.0
66.	$\text{n}+\text{no} \rightleftharpoons \text{n}_2+\text{o}$			3.50E+13	0.0	330.0
67.	$\text{n}+\text{o}_2 \rightleftharpoons \text{no}+\text{o}$			2.65E+13	0.0	6400.0
68.	$\text{n}_2\text{o}+\text{o} \rightleftharpoons 2\text{no}$			2.90E+13	0.0	23150.0
69.	$\text{n}_2\text{o}+\text{oh} \rightleftharpoons \text{n}_2+\text{ho}_2$			2.00E+12	0.0	21060.0
70.	$\text{n}_2\text{o}(\text{+m}) \rightleftharpoons \text{n}_2+\text{o}(\text{+m})$			1.30E+11	0.0	59620.0
	Low pressure limit: 0.62000E+15 0.00000E+00			0.56100E+05		
	h2	Enhanced by	2.000E+00			
	h2o	Enhanced by	6.000E+00			
	ch4	Enhanced by	2.000E+00			
	co	Enhanced by	1.500E+00			
	co2	Enhanced by	2.000E+00			
71.	$\text{ho}_2+\text{no} \rightleftharpoons \text{no}_2+\text{oh}$			2.11E+12	0.0	-480.0
72.	$\text{no}+\text{o}+\text{m} \rightleftharpoons \text{no}_2+\text{m}$			1.06E+20	-1.4	0.0
73.	$\text{no}_2+\text{o} \rightleftharpoons \text{no}+\text{o}_2$			3.90E+12	0.0	-240.0
74.	$\text{no}_2+\text{h} \rightleftharpoons \text{no}+\text{oh}$			1.32E+14	0.0	360.0

APÊNDICE A – REPRESENTAÇÃO 3D DAS MALHAS COMPUTACIONAIS DA CÂMARA DE COMBUSTÃO EMPREGADAS NESSE TRABALHO

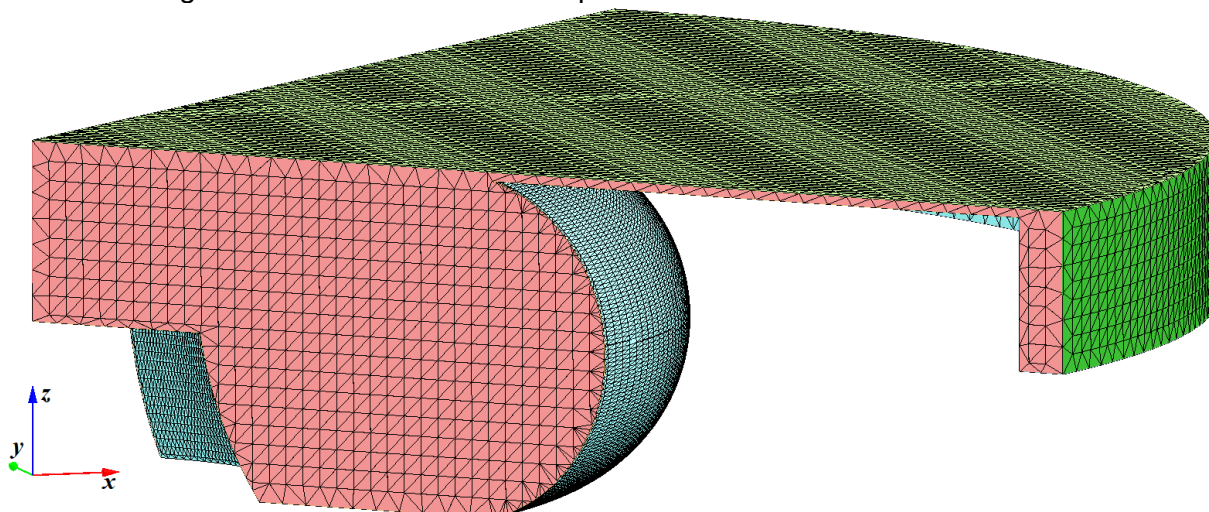
Este apêndice contém a representação espacial das malhas computacionais empregadas nesse trabalho das câmaras de combustão no ponto morto superior, segundo o apresentado na Seção 4.3.

Figura 86 – Malha grosseira para a câmara de combustão no PMS



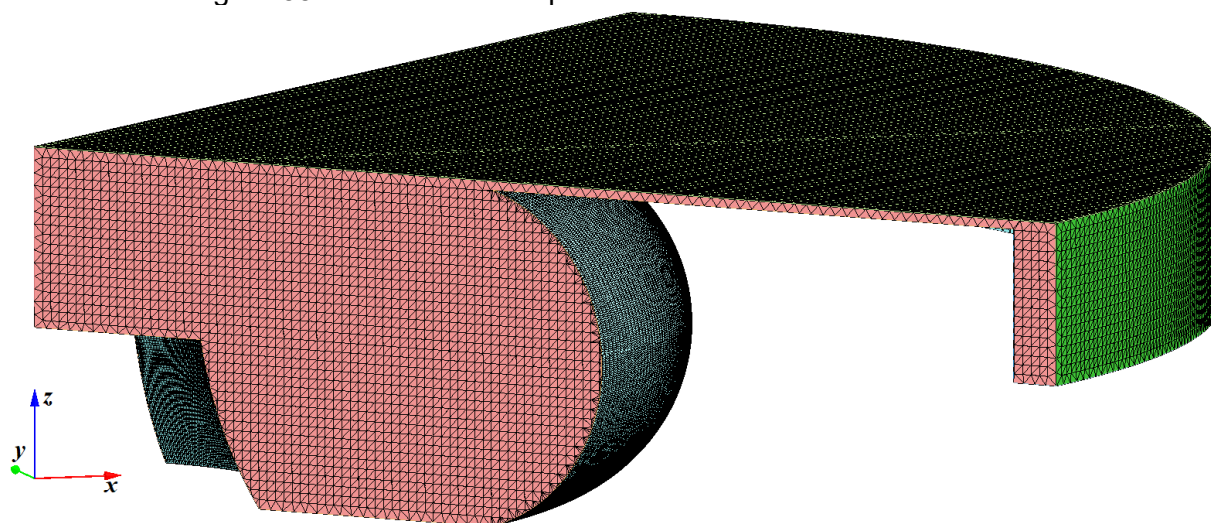
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 87 – Malha intermediária para a câmara de combustão no PMS



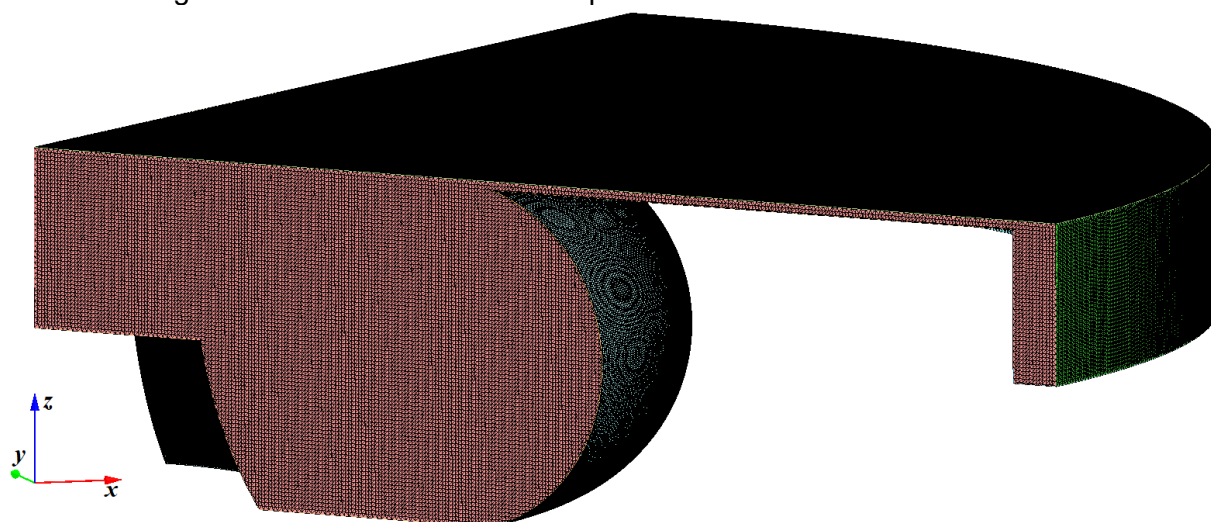
Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 88 – Malha refinada para a câmara de combustão no PMS



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

Figura 89 – Malha muito refinada para a câmara de combustão no PMS



Fonte: Elaborado pelo Autor (2022).

APÊNDICE B – EXEMPLO DE CÁLCULO PARA OBTENÇÃO DAS FRAÇÕES MOLARES DAS ESPÉCIES PRESENTES NA CÂMARA DE COMBUSTÃO NA CONDIÇÃO INICIAL DE SIMULAÇÃO

Este apêndice contém um exemplo de obtenção das frações molares de oxigênio, nitrogênio, metano e dióxido de carbono presentes da câmara de combustão no início da simulação. Esses valores são inseridos em “IVC Mixture” na aba “Initial Condition” dentro do Forte, como mencionado na Seção 4.4.3.1, página 117.

Considerando então, como valores numéricos (supondo estes mensurados experimentalmente): $\dot{m}_{ar} = 20 \text{ kg/h}$ e $\dot{m}_{biogás} = 0,5 \text{ kg/h}$ e o biogás composto por 65% de metano (CH_4) e 35% de dióxido de carbono (CO_2).

A massa molar para esse biogás é dada por

$$MM_{biogás} = 0,65 \cdot (12 + 4 \cdot 1) + 0,35 \cdot (12 + 2 \cdot 16) \rightarrow MM_{biogás} = 25,80 \text{ kg/kmol}$$

Por sua vez, a massa molar do ar, considerando 21% de O_2 e 79% de N_2 é

$$MM_{ar} = 0,21 \cdot 2 \cdot 16 + 0,79 \cdot 2 \cdot 14 \rightarrow MM_{ar} = 28,84 \text{ kg/kmol}$$

Aplicando-se então as Eqs. (75) e (76), obtém-se

$$\dot{M}_{ar} \cong 0,6934813 \text{ kmol/h}$$

$$\dot{M}_{biogás} = 0,0193798 \text{ kmol/h.}$$

Por conseguinte, aplicando-se as Eqs. (77) e (78), tem-se que

$$x_{ar} \cong 0,9728140$$

$$x_{biogás} \cong 0,0271860.$$

Por fim, das Eqs. (79), tem-se que:

$$x_{\text{O}_2} \cong 0,204291$$

$$x_{\text{N}_2} \cong 0,768523$$

$$x_{\text{CH}_4} \cong 0,017671$$

$$x_{\text{CO}_2} \cong 0,00952$$

Logo, os reagentes para o modo *dual-fuel*, considerando os dados anteriores, podem ser descritos por

