

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA**  
**MECÂNICA**

**ANÁLISE EXPERIMENTAL E EM CFD DE MOTOR DIESEL  
ALIMENTADO COM BIOCOMBUSTÍVEIS ADAPTÁVEIS À  
MATRIZ ENERGÉTICA BRASILEIRA EM MODO *DUAL FUEL***

**TÚLIO AUGUSTO ZUCARELI DE SOUZA**

Itajubá, Fevereiro de 2024

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA**

**MECÂNICA**

**TÚLIO AUGUSTO ZUCARELI DE SOUZA**

**ANÁLISE EXPERIMENTAL E EM CFD DE MOTOR DIESEL**

**ALIMENTADO COM BIOCOMBUSTÍVEIS ADAPTÁVEIS À**

**MATRIZ ENERGÉTICA BRASILEIRA EM MODO *DUAL FUEL***

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como pré-requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Área de concentração: Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxos (TFMF).

Orientador: Dr. Christian J. R. Coronado

Co-orientadora: Dra. Bruna O. P. S. Siqueira

Itajubá, fevereiro de 2024

*Per aspera ad astra*  
(ditado latino)

## AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores: professor Christian Coronado, por, desde a época da graduação, ter incentivado meu trabalho como pesquisador e ter oferecido apoio nos momentos dúvida e dificuldade; e à minha co-orientadora Bruna Siqueira, por ter prontamente aceitado o convite para a co-orientação.

Aos colegas de grupo: Roberto Berliini, pelo convite para participação no Projeto ROTA 2030 e pela idealização do tema de pesquisa, sem o qual esta tese não seria possível; Gabriel Marques, pela amizade de longa data e pelo auxílio em diversos pontos desta e de outras pesquisas; Gustavo Frez, pela colaboração nos trabalhos de modelagem numérica e na adaptação dos modelos cinéticos; João Luiz, pela amizade e trabalho conjunto; e aos colegas Luís Filipe, César, Nelly, Luís Pedro e Alisson.

À minha família: meu pai, Carlos, por sempre ter incentivado o conhecimento científico e ter oferecido todas as condições para que eu tivesse acesso a uma boa educação; à minha mãe, Camila, pela constante preocupação com meu bem-estar e pelo exemplo de ousadia e sucesso em tudo que faz; à minha irmã, Bianca, por ser uma das melhores pessoas que eu conheço e por me seguir na busca pelo título de “doutor”, ainda que pela medicina e não pelo doutorado; e à minha prima, Isabella, por sempre me motivar a fazer meu melhor.

À professora da Università degli Studi di Napoli Federico II, Maria Cristina Cameretti, e aos colegas Roberta, Marco e Vincenzo, por todo o aprendizado na análise CFD em motores e por terem me recebido tão bem em Napoli.

Ao CNPq e à FUNDEP (Projeto ROTA 2030 N° 27192\*05), por terem financiado esta pesquisa.

## RESUMO

Com a crescente demanda energética, o surgimento de legislações ambientais cada vez mais rigorosas e com os carros elétricos longe de se tornarem uma realidade em larga escala, novos vetores energéticos têm sido propostos como soluções para motores de combustão interna. Neste sentido, biogás, biometano e gases de síntese representam opções que, embora ainda não amplamente utilizadas no transporte brasileiro, merecem atenção. Além do uso de novas fontes energéticas, técnicas inovadoras – como o modo *dual fuel* – podem aproveitar ainda mais o potencial de diferentes combustíveis, como o HVO (do inglês “óleo vegetal hidrotratado”), para otimizar o funcionamento do motor dos pontos de vista de eficiência e das emissões de poluentes. Desta forma, na presente tese propõe-se uma análise experimental e numérica de um motor diesel monocilindro operando em modo *dual fuel* com combustíveis adaptáveis à matriz energética brasileira. Foi observado o potencial destes combustíveis na substituição parcial do diesel, com potencial redução nas emissões de NO<sub>x</sub> (até 25,8%) e material particulado (até 86%), associado a um pequeno decréscimo nas eficiências térmica (até 12,5%) e de combustão (até 4,2%). No caso da substituição de diesel por HVO, foram observadas melhorias tanto nas emissões (NO<sub>x</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, HC e material particulado) como na eficiência térmica. Por fim, a combinação dos combustíveis gasosos com o HVO levou à mesma tendência observada para o diesel, porém com resultados superiores em termos de eficiência e emissões. Em todos os casos, o modelo CFD em ANSYS Forte® forneceu análises adicionais dos resultados experimentais, e representa uma opção para extrapolação de resultados, otimização e predição da operação do motor sem a necessidade de testes adicionais.

**Palavras-chave:** motor diesel; *dual fuel*; biocombustíveis; CFD; cinética química;

## ABSTRACT

With the growing energy demand, the rise of stricter environmental regulations, and the large-scale application of electric vehicles far from being a reality, new energy vectors for internal combustion engines have been considered. In this sense, biogas, biomethane, and syngas represent options that deserve some attention, despite not being widely used in Brazilian transportation. In addition to the use of new energy sources, innovative techniques – such as the *dual fuel* mode – can improve even further the potential of different fuels, such as HVO (hydrotreated vegetable oil), in order to optimize the engine operation in terms of efficiency and pollutants emissions. Therefore, the present thesis proposes experimental and numerical analyses in a *single*-cylinder diesel engine operating in *dual fuel* mode with fuels adaptable to the Brazilian energy matrix. The potential of these fuels as partial replacements for diesel was verified, reducing NO<sub>x</sub> (up to 25.8%) and particulate matter (up to 86%) emissions, associated to a small decrease in thermal (up to 12.5%) and combustion (up to 4.2%) efficiencies. When diesel was replaced by HVO, improvements were observed in both emissions (NO<sub>x</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, HC and particulate matter) and thermal efficiency. Finally, the combination of gaseous fuels with HVO led to the same trend observed for diesel, but with superior results for efficiency and emissions. In all the studied cases, the ANSYS Forte® CFD model offered additional understanding of experimental results, representing an option for extrapolation of results, optimization, and prediction of engine operation without the need of additional tests.

**Keywords:** diesel engine; *dual fuel*; biofuels; CFD; chemical kinetics;

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1: (a) esboços de Rudolf Diesel para ilustrar o ciclo termodinâmico do motor Diesel; (b) configuração mecânica simplificada do primeiro motor Diesel (DIESEL, 1895). .....	8
Figura 2: ilustração do diagrama PV do ciclo Diesel real (NuclearPower.net, 2024). .....	10
Figura 3: geometria básica e principais dimensões de um motor Diesel (HEYWOOD, 2018a). .....	11
Figura 4: processo genérico de transesterificação (WIDAYAT; WIBOWO; HADIYANTO, 2013). .....	15
Figura 5: processo simplificado de hidrotreamento de trioleína para produção de HVO (heptadecano e octadecano) (LORENZI <i>et al.</i> , 2020).....	17
Figura 6: curvas de pressão em motores com combustão normal e com batida (HEYWOOD, 2018a). .....	25
Figura 7: exemplo de sistema de formação de mistura homogênea em motores HCCI (KUMANO; YAMASAKI; IIDA, 2007). .....	27
Figura 8: principais modos de injeção na operação <i>dual fuel</i> com gás natural (INDRAJUANA <i>et al.</i> , 2018b). .....	29
Figura 9: medidor angular AVL Indimicro. ....	31
Figura 10: analisador de gases PC Multigás.....	33
Figura 11: esquema de montagem da bancada de testes do LMT-UNIFEI. Adaptada de (DA COSTA <i>et al.</i> , 2021).....	34
Figura 12: medidor/controlador de vazão de gases Aalborg DPC (AALBORG, 2020). .....	35
Figura 13: bancada experimental para testes dual fuel no LMT-UNIFEI (DA COSTA <i>et al.</i> , 2022). .....	36
Figura 14: modelos 0D para simulação em motores com (a) uma zona, (b) duas zonas e (c) três zonas. Adaptado de (CATON, 2016). .....	45
Figura 15: sistema termodinâmico aberto genérico (HEYWOOD, 2018a). .....	46
Figura 16: passo a passo da injeção e combustão do combustível em um motor diesel de injeção direta: 1) parcelas de injeção; 2) injeção de combustível; 3) atomização de gotículas; 4) arraste de ar e; 5) vaporização de gotículas. Adaptado de (ANSYS, 2020d).....	53
Figura 17: relações geométricas do bocal de um injetor (ANSYS, 2020b).....	54
Figura 18: evolução da complexidade dos modelos cinéticos para combustão (EGOLFOPOULOS <i>et al.</i> , 2014). .....	60
Figura 19: fluxograma da decomposição e recombinação de metano (CURRAN, 2019). .....	61
Figura 20: Exemplo de resultado do Chemkin® com (a) curva de pressão no cilindro e (b) emissões de CO <sub>2</sub> em ppm por ângulo do virabrequim. ....	63
Figura 21: validação dos atrasos de ignição do dodecano e do hexadecano em diversas condições.....	66
Figura 22: pistão e válvulas do motor Buffalo BDFE 10.0. ....	73
Figura 23: interface do ANSYS FORTE®.....	74
Figura 24: geometria da câmara de combustão do Buffalo BFDE 10.0 em ambiente ANSYS SpaceClaim®.....	75

Figura 25: malha da câmara de combustão do Buffalo BFDE 10.0.....	76
Figura 26: principais parâmetros de combustão do motor (PINTO et al., 2023b). .....	84
Figura 27: eficiência de eixo do motor operando com diesel.....	86
Figura 28: eficiência de eixo do motor operando com HVO. ....	88
Figura 29: comparação das curvas de pressão e de liberação de calor do diesel obtidas experimentalmente e no modelo do ANSYS Forte®.....	89
Figura 30: comparação das curvas de pressão e de liberação de calor do HVO obtidas experimentalmente e no modelo do ANSYS Forte®.....	90
Figura 31: estimativa de temperaturas no interior do cilindro. ....	93
Figura 32: início da combustão para diesel-syngas: (a) <i>single fuel</i> , (b) EF = 13.18%, (c) EF = 19.62%. ....	95
Figura 33: início da combustão para HVO-syngas: (a) <i>single fuel</i> , (b) EF = 13.63%, (c) EF = 19.72%. ....	95
Figura 34: início da combustão para diesel-biogás: (a) <i>single fuel</i> , (b) EF = 31.77%, (c) EF = 48.97%. ....	96
Figura 35: início da combustão para HVO-biogás: (a) <i>single fuel</i> , (b) EF = 31.44%, (c) EF = 40.72%. ....	97
Figura 36: início da combustão para diesel-biometano: (a) <i>single fuel</i> , (b) EF = 36.28%, (c) EF = 56.15%. ....	97
Figura 37: início da combustão para HVO-biometano: (a) <i>single fuel</i> , (b) EF = 36.66%, (c) EF = 56.44%. ....	98
Figura 38: emissões específicas de NO <sub>x</sub> nos modos <i>single</i> e <i>dual fuel</i> para diesel e HVO. ....	99
Figura 39: emissões específicas de CO nos modos <i>single</i> e <i>dual fuel</i> para diesel e HVO. ....	100
Figura 40: emissões específicas de CO <sub>2</sub> nos modos <i>single</i> e <i>dual fuel</i> para diesel e HVO. ....	101
Figura 41: emissões específicas de material particulado nos modos <i>single</i> e <i>dual fuel</i> para diesel e HVO.....	102
Figura 42: eficiência de combustão do motor diesel operando nos modos <i>single</i> e <i>dual fuel</i> com diesel.....	103
Figura 43: eficiência de combustão do motor diesel operando nos modos <i>single</i> e <i>dual fuel</i> com HVO. ....	104



## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: principais parâmetros e relações geométricas de um motor Diesel (HEYWOOD, 2018a). .....	12
Tabela 2: principais propriedades do diesel comercial no Brasil (ANP, 2013). 14	
Tabela 3: efeito do uso de HVO na performance e nas emissões de motores diesel (DE SOUZA et al., 2022). .....	18
Tabela 4: Composição média de um gás natural brasileiro (GASMIG, 2019). . 21	
Tabela 5: Principais especificações do motor Buffalo BFDE 10.0 (DA COSTA, 2021). .....	31
Tabela 6: Descrição dos sensores utilizados na bancada experimental. ....	32
Tabela 7: constantes nos modelos Standard k- $\epsilon$ ou RNG k- $\epsilon$ (ANSYS, 2020a). .....	71
Tabela 8: Dados experimentais para operação <i>dual fuel</i> com diesel .....	79
Tabela 9: Dados experimentais para operação <i>dual fuel</i> com HVO.....	80
Tabela 10: Cálculos iniciais para operação <i>dual fuel</i> . .....	82
Tabela 11: Análise da combustão para operação <i>dual fuel</i> .....	85

## LISTA DE ABREVIATURAS

- ABIOVE – Agência Brasileira das Indústrias de Óleos Vegetais
- ABNT – Associação Brasileira de Normas Técnicas
- AFe – Relação ar-combustível estequiométrica
- ANP – Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
- B – diâmetro do pistão
- BTE – eficiência térmica do motor
- CAD – *Computer Aided Design*
- CD – Duração total da combustão
- CDF – *Conventional Dual fuel*
- CFD – Fluidodinâmica computacional
- CO – Monóxido de carbono
- CO<sub>2</sub> – Dióxido de carbono
- DCD – Duração da combustão difusa
- DNS – Direct Numerical Simulation
- EF – Taxa de substituição de energia
- EGR – Recirculação dos gases de exaustão
- H<sub>2</sub> – Hidrogênio
- H<sub>2</sub>S – Sulfeto de hidrogênio
- HC – Hidrocarbonetos não queimados
- HCCI – *Homogeneous charge compression ignition*
- HPDI – *High Pressure Direct Injection*
- HRR – Taxa de liberação de calor
- HVO – Óleo Vegetal Hidrotratado

ID – Atraso de ignição

IVC – *Inlet Valve Closed*

LES – *Large Eddy Simulation*

MFB90 – ponto onde 90% da massa de combustível são queimados

MP – Material particulado

N<sub>2</sub> – Nitrogênio

N<sub>2</sub>O – Óxido nitroso

NH<sub>3</sub> – Amônia

NO<sub>x</sub> – Óxidos de nitrogênio

O<sub>2</sub> - Oxigênio

Opac – opacidade

PCD – Duração da combustão pré-misturada

PCI – Poder Calorífico Inferior

PMI – Ponto morto inferior

PMS – Ponto morto superior

PNPB – Programa Nacional de Produção de Uso de Biodiesel

PV – Diagrama Pressão-Volume

RANS – Reynolds-Averaged Navier-Stokes

RCCI – *Reactivity Controlled Compression Ignition*

SMD - Diâmetro Médio de Sauter

SOC – Início da combustão

SOI – Início da injeção

SPK – Querosene parafínico sintético

UCSD – *University of California San Diego*

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\%E$  – porcentagem do elemento E no combustível

$\bar{C}_{p,f}$  – calor específico do combustível

$\bar{D}_{k,f}$  – difusividade mássica das espécies em fase de vapor

$\dot{Q}_0$  – fluxo de calor recebido pelas gotículas

$\dot{Q}^C$  – liberação de calor por reações químicas

$\dot{Q}^S$  – liberação de calor por interações do spray

$\dot{Q}_W$  – transferência de calor para o sistema

$\dot{Q}_{rad}$  – troca de calor por radiação

$\bar{S}_p$  – Velocidade média do pistão

$\bar{V}_{média}$  – velocidade média do combustível na entrada do bocal do injetor

$\dot{m}_{ar\ seco}$  – vazão mássica de ar seco

$\dot{m}_{ar}$  – vazão mássica de ar total

$\dot{m}_{comb,sec}$  – vazão mássica de combustível secundário

$\dot{m}_{diesel}$  – vazão mássica de diesel

$\dot{m}_{exh}$  - vazão mássica da exaustão

$A_{ch}$  - área do topo do cilindro

$A_p$  – área da coroa do pistão

$A_{parede}$  – área da parede do cilindro

$A_s$  – área instantânea da câmara de combustão

$A_w^i$  – superfície de contato da zona

$B_{M,k}$  – número de Spalding

$B_T$  – número de Spalding para transferência de calor

$C_{11}$  – parâmetro de ajuste da correlação de Woschni

$C_d$  – coeficiente de descarga do injetor

$\bar{D}$  – difusividade mássica

$D_{bocal}$  – diâmetro do bocal do injetor

$\dot{E}$  – taxa de variação de energia

$EE_{gás}$  – emissão específica do gás

$E_a$  – energia de ativação de Arrhenius

$F_{M,k}$  – fator para cálculo do número de Sherwood

$Le_\infty$  - número de Lewis

$N_{got}$  – número de gotículas após o break-up

$N_r$  – número de parcelas de spray

$Pe_L$  – número de Peclet da gotícula de líquido

$Q_{núcleo}$  – fluxo de calor para o número da gotícula

$\bar{R}$  – constante dos gases ideais

$R_{BM}$  – relação manivela-pistão

$R_{BS}$  – relação curso-diâmetro

$Sh_k^*$  – número de Sherwood

$Sc_{k,f}$  – número de Schmidt

$S_p$  – Velocidade instantânea do pistão

$T_\infty$  - temperatura da vizinhança

$T_{parede}$  – temperatura da parede do cilindro

$T_{sup}$  – temperatura da superfície da gotícula

$V_{inst}$  – volume instantâneo

$\dot{W}$  – trabalho produzido

$Y_k^i$  – fração mássica da espécie k

$a_p$  – aceleração instantânea do pistão

$b_a$  – coeficiente de temperatura de Arrhenius

$c_{gás}$  – concentração do componente no gás de exaustão não-diluído

$d_{got}$  – diâmetro das gotículas após do break-up

$k_{hd}$  – fator de correção de umidade para as emissões de  $NO_x$

$k_L$  – condutividade térmica da gotícula

$\dot{m}$  – vazão mássica

$p_{sat}$  – pressão de saturação do vapor de água

$p_{vapor}$  – pressão parcial de vapor da água contida no ar

$q_{m,gás}$  – emissão mássica de poluente

$r_{drp}$  – raio da gotícula

$u_{gás}$  – razão de densidades entre componente e gás de exaustão

$u_p$  – velocidade das partículas de uma parcela de spray

$v_{swirl}$  – velocidade do swirl

$y_{\infty,k}$  – fração de vapor na superfície do ar

$y_{s,k}$  – fração de vapor na superfície do combustível

$a$  – comprimento da manivela

$A_a$  – fator pré-exponencial de Arrhenius

$c$  – distância momentânea entre pistão e ponto morto superior

$C_{12}$  – parâmetro de ajuste da correlação de Woschni

$C_2$  – parâmetro de ajuste da correlação de Woschni

$c_p$  – calor específico a pressão constante

$c_v$  – calor específico a volume constante

$C_{\epsilon 1}$  – constante nos modelos Standard k- $\epsilon$  ou RNG k- $\epsilon$

$C_{\varepsilon 2}$  – constante nos modelos Standard k- $\varepsilon$  ou RNG k- $\varepsilon$

$C_{\varepsilon 3}$  – constante nos modelos Standard k- $\varepsilon$  ou RNG k- $\varepsilon$

$C_{\mu}$  – constante nos modelos Standard k- $\varepsilon$  ou RNG k- $\varepsilon$

$d_{32}$  – Diâmetro Médio de Sauter

$D_{dif}$  – coeficiente de difusão

F – Fatores da formulação de Wexler

$f_{f,w}$  – fator para cálculo do fluxo do gás de exaustão em via úmida

$F^S$  – taxa específica de ganho de momento

G – somatória dos produtos das pressões pelos volumes das zonas

h – entalpia

$H_a$  – umidade do ar de admissão

$H_f$  – fator de correção da umidade

$h_{HT}$  – coeficiente de transferência de calor

k – taxa de reação de Arrhenius

$k_{w,r}$  – fator de correção de seco a úmido

l – comprimento da biela

L – curso do pistão

$L/D_{bocal}$  – relação comprimento/diâmetro do bocal do injetor

M – massa molar

N – rotação do motor

$Nu_H$  – número de Nusselt para a transferência de calor

P - pressão

$P_{amb}$  – pressão ambiente

$P_{esc}$  – pressão no escape

$P_M$  – pressão motorizada do cilindro

Pot – potência de eixo do motor

$Pr$  – número de Prandtl

$Q$  – transferência de calor

$R$  – constante universal dos gases ideais

$R/D_{\text{bocal}}$  – relação raio de curvatura/diâmetro do bocal do injetor

$r_c$  – taxa de compressão

$Re$  – número de Reynolds

$s$  – distância manivela-pistão

$s_p$  – penetração do spray

$T$  – temperatura

$t$  – tempo de escoamento

$T_{\text{adm}}$  – temperatura de admissão

$T_{\text{amb}}$  – temperatura do ar ambiente

$T_{\text{esc}}$  – temperatura de escape

$T_{\text{óleo}}$  – temperatura do óleo de resfriamento

$U$  – energia interna

$UR$  – umidade relativa

$V$  – Volume

$V_c$  – volume mínimo do cilindro

$V_d$  – volume deslocado pelo pistão

$W$  – massa molecular

$w$  – velocidade do gás segundo correlação de Woschni

$We$  – número de Weber



$y$  – coeficiente do hidrogênio

$y(m)$  – função de distribuição radial

$z$  – coeficiente do oxigênio

$\Delta P^{inj}$  – gradiente de pressão no injetor

$AFe$  – relação ar-combustível na estequiometria

$H$  – termo convectivo

$Torq$  – torque do motor

$J$  – fluxo de calor de condução e difusão entálpica

## LETRAS GREGAS

$\theta$  - ângulo da manivela

$\dot{\omega}_{ki}$  – taxa de produção da k-ésima espécie

$\delta_e$  – fator para cálculo do fluxo de calor para o núcleo das gotículas

$\eta_c$  – eficiência de combustão

$\lambda_T$  – condutividade térmica turbulenta

$\lambda_{gas}$  – condutividade do gás

$\tau_b$  – tempo de break-up do líquido injetado

$\dot{\omega}$  – taxa de produção molar

$\emptyset$  - razão de equivalência

$\Gamma$  – tensor das tensões da convecção não linear

$\lambda$  – fator lambda

$\alpha$  – coeficiente para cálculo do número de Nusselt

$\beta$  – coeficiente para cálculo do número de Nusselt

$\gamma$  – coeficiente para cálculo do número de Nusselt

$\varepsilon$  – taxa de dissipação de energia cinética turbulenta

$\zeta$  – fator para cálculo da massa da mistura de gases

$\mu$  – viscosidade do gás

$\rho$  – massa específica

$\varsigma$  – relação de calores específicos

$\sigma$  – tensor de tensoes viscosas

$\varphi$  – parâmetro para cálculo do número de Spalding para transferência de calor

$\chi$  – fator para cálculo de  $\delta_e$

$\omega$  – rotação do motor em radianos por segundo

$\vartheta$  – viscosidade cinemática

$\phi$  – termo de fluxo turbulento

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	1
1.1	Objetivos .....	4
1.1.1	Objetivos específicos.....	4
1.2	Motivação e relevância.....	4
1.3	Estrutura do trabalho.....	6
2	MOTORES DIESEL.....	7
2.1	Origem .....	7
2.2	Princípio de funcionamento.....	8
2.3	Relações geométricas.....	10
3	COMBUSTÍVEIS: PROPRIEDADES E MODOS DE OPERAÇÃO .....	13
3.1	Combustíveis para motores Diesel.....	13
3.1.1	Diesel.....	13
3.1.2	Biodiesel .....	15
3.1.3	HVO.....	16
3.2	Combustíveis para modo <i>dual fuel</i> .....	18
3.2.1	Hidrogênio .....	18
3.2.2	Syngas.....	20
3.2.3	Gás natural .....	21
3.2.4	Biogás.....	22
3.2.5	Biometano .....	23
3.3	Modos de operação.....	24
3.3.1	Combustão pré-misturada .....	24
3.3.2	Combustão não pré-misturada .....	25
3.3.3	Modo HCCI.....	26
3.3.4	Modo <i>dual fuel</i> .....	27
4	BANCADA EXPERIMENTAL E ANÁLISE DE DADOS.....	30
4.1	Bancada experimental.....	30
4.2	Cálculos preliminares .....	36
4.3	Análise da combustão .....	39
4.4	Emissões.....	42
5	SIMULAÇÃO DA COMBUSTÃO EM MOTORES DIESEL.....	44
5.1	Fundamentos de simulação zero-dimensional .....	44

5.2	Simulação da injeção direta em motores Diesel .....	51
5.3	Modelos de cinética química .....	59
5.4	Fundamentos da análise CFD em motores de combustão interna .....	66
6	RESULTADOS .....	78
6.1	Resultados experimentais .....	78
6.2	Análise de eficiência.....	86
6.3	Validação do modelo computacional.....	88
6.4	Análise de temperatura .....	90
6.5	Análise de emissões .....	98
6.6	Eficiência da combustão .....	102
7	CONCLUSÕES.....	105

# 1 INTRODUÇÃO

O constante aumento da demanda energética e a preocupação ambiental têm acelerado as buscas por novas fontes de energia. Este esforço se estende por todos os setores que envolvem, de alguma maneira, processos de conversão de energia, nos quais se inclui, em posição de destaque, o setor de transportes. Com o transporte majoritariamente dominado por combustíveis fósseis (como gasolina, diesel e querosene de aviação) e com o uso de baterias e células a combustível ainda distante, os combustíveis alternativos apenas passaram a ter participação de destaque nos cenários nacional e mundial nas últimas décadas.

No Brasil, o uso de combustíveis renováveis para transporte se iniciou por meio do Programa Nacional do Álcool, que estabeleceu diretrizes para a inserção do etanol de cana de açúcar como combustível automotivo em território nacional (Presidência da República, 1975). Quanto aos motores de ignição por compressão, como é o caso dos motores Diesel que dominam a propulsão de veículos pesados, o combustível renovável mais amplamente utilizado no país é o biodiesel. A história desta fonte renovável no Brasil se inicia em 2003, por meio de um decreto que estabelecia um grupo de trabalho interministerial para realizar estudos acerca da viabilidade do uso de biodiesel em território nacional (Presidência da República, 2003). Estes esforços culminam, em 2004, na criação do Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel (PNPB), que definiu as bases para produção e comercialização deste combustível no Brasil (Ministério de Minas e Energia, 2020).

Desde então, diversas políticas vêm sendo implementadas, levando ao cenário atual do transporte nacional em que etanol e biodiesel vêm tendo cada vez mais participação no cenário energético. O diesel comercial brasileiro, por exemplo, conta com a presença de biodiesel desde 2004, quando uma fração opcional de 2% era permitida (ANP, 2004). Hoje, esta fração já é bem mais elevada, sendo de 12% em 2023 e com um máximo de 15% previsto para 2026 (Governo do Brasil, 2023).

Com o desenvolvimento de novas tecnologias de produção, a tendência é que o biodiesel passe, num futuro próximo, a dividir espaço com novos combustíveis renováveis. Embora alguns deles, como o hidrogênio, não devam ser empregados em larga escala num futuro tão próximo, um promissor combustível que pode ser produzido a partir de óleos vegetais e hidrogênio tem sido amplamente discutido no cenário nacional: o HVO, também chamado “diesel verde” (MÜLLER-CASSERES et al., 2021).

O HVO é produzido a partir do tratamento de óleos vegetais ou residuais e já é uma realidade em países da Europa e Estados Unidos. Na América do Sul, uma mistura de 5% HVO e 95% diesel foi produzida por uma planta piloto da Petrobras (2020), enquanto uma planta com capacidade diária de 20.000 barris de HVO, querosene parafínico sintético (SPK) e nafta está em construção no Paraguai (ECB Group, 2021). Simultaneamente, outros governos da região, como Bolívia e Uruguai, também sinalizaram interesse na produção de HVO por meio de mudanças na legislação e incentivo a empreendimentos (DE SOUZA et al., 2022).

Além da substituição direta entre combustíveis, uma alternativa para um transporte mais sustentável é o uso de modos de operação mais flexíveis, eficientes e menos poluentes. Embora alguns dos principais modos de operação e seus benefícios sejam abordados neste texto, um foco especial será dado à chamada operação *dual fuel*, que combina propriedades de dois combustíveis diferentes na busca por uma operação ótima do ponto de vista de performance e/ou redução de emissões do motor. Em adição aos benefícios técnicos associados à aplicação desta tecnologia, o uso de dois combustíveis (incluindo opções potencialmente renováveis) garante ainda mais flexibilidade à operação sob aspectos técnicos, econômicos e ambientais.

Ao contrário do que se observa em *blends* de combustíveis, como é o caso do diesel S10 (mistura de diesel e biodiesel), a operação *dual fuel* utiliza combustíveis introduzidos de maneiras diferentes. De forma resumida, um combustível primário (como gasolina ou etanol) é misturado com o ar e admitido ao cilindro, sendo um combustível secundário (como o diesel) injetado diretamente na câmara de combustão quando a mistura ar-combustível já foi comprimida até atingir pressão e temperatura adequadas ao início da

combustão. Em outras palavras, um motor *dual fuel* convencional possui características em comum tanto com motores Otto (já que admite uma mistura ar-combustível) como Diesel (pois a ignição ocorre pela injeção de um combustível, e não por centelha).

A escolha dos termos “alta” e “baixa” reatividade está associada à capacidade de autoignição do combustível e é frequentemente utilizada na literatura para pesquisas em motores *dual fuel*, visto que boa parte dos estudos se concentra no uso de gasolina e diesel (ZHANG et al., 2022). Todavia, na presente tese, serão utilizados os termos primário (para o combustível como o diesel, injetado diretamente no cilindro) e secundário (para o combustível injetado na linha de admissão, como o biometano), assim como utilizado por Kumar et al. (2020).

Devido à particularidade de o modo *dual fuel* contar com a introdução não-simultânea de dois combustíveis diferentes e de formas diferentes, sua operação tende a ser um pouco mais complexa que em um motor convencional. Desta forma, para o estudo dos combustíveis desejados do modo *dual fuel*, foram necessárias adaptações em um motor diesel convencional, de forma que a introdução de combustíveis secundários junto ao ar de admissão fosse possível.

Nesta pesquisa, além da análise de laboratório, foi também desenvolvida uma análise numérica para algumas das condições testadas. A análise computacional foi inicialmente realizada em OD, visando a validação dos principais resultados com o mínimo tempo computacional, sendo que em seguida os mesmos parâmetros foram aplicados à análise CFD em ANSYS Forte® para um resultado mais preciso. A fim de se verificar a fidelidade de diferentes modelos teóricos na previsão da queima dos combustíveis escolhidos em modo *dual fuel*, as análises CFD foram desenvolvidas em conjunto a experimentos em laboratório. Deste modo, a verificação de um modelo matemático capaz de reproduzir tais fenômenos com precisão suficiente permitirá agilizar futuras análises e melhorias, tanto para o motor como para diferentes modos de operação. A proposta visa, ainda, preencher uma ausência de análises CFD para combinações menos conhecidas de combustíveis na literatura, como é o caso da operação *single* e *dual fuel* com HVO.



## 1.1 Objetivos

Este trabalho visa o desenvolvimento de uma bancada experimental de motor diesel em modo *dual fuel* para utilização de combustíveis adaptáveis à matriz energética brasileira, bem como o desenvolvimento de análises computacionais 0D e 3D do motor estudado para melhor compreensão do fenômeno da combustão. Como combustível primário, serão utilizados diesel e HVO. Como combustível secundário, serão avaliados combustíveis gasosos coerentes com o cenário nacional, como biometano, biogás e syngas de biomassa.

### 1.1.1 Objetivos específicos

Os objetivos específicos da presente tese são:

- Fundamentação teórica sobre o funcionamento básico de motores diesel, combustíveis convencionais e alternativos mais utilizados, modos de operação e pesquisas de objetivo semelhante;
- Adaptação da bancada experimental do laboratório para operação *dual fuel* com os combustíveis a serem incluídos no estudo, incluindo sistema de injeção do combustível secundário junto à linha de admissão de ar;
- Desenvolvimento de metodologia para processamento dos dados de performance e emissões levantados em laboratório;
- Validação dos modelos numéricos 0D e CFD com dados experimentais;
- Escolha de modelos de cinética química para os modos de operação *dual fuel* a serem incluídos no estudo;
- Análise CFD do motor em modo *dual fuel* e discussão dos principais resultados.

## 1.2 Motivação e relevância

Devido à crescente demanda energética, às preocupações ambientais e a interesses conflitantes de diversos setores econômicos, o caminho que representará o futuro do transporte é incerto. Enquanto alguns países defendem a eletrificação de veículos automotivos e outros apresentam regulamentações que parecem indicar um futuro baseado em biocombustíveis, os combustíveis fósseis continuam a garantir uma parcela majoritária na energia para mobilidade

(de Souza, et al., 2022). No Brasil, por exemplo, o consumo de óleo diesel subiu de 50.648 mil m<sup>3</sup> em 2020 para 56.826 mil m<sup>3</sup> em 2022, ao passo que o consumo de gasolina se elevou de 26.151 para 31.419 mil m<sup>3</sup> no mesmo período (EPE, 2023a). Desta forma, enquanto questões ambientais indicam um fim gradual dos combustíveis de origem fóssil, a questão econômica faz destes a principal fonte de energia no setor de mobilidade – o que não deve mudar em um futuro tão próximo. Limitados a cargas leves e com imensas barreiras econômicas e logísticas a serem transpostas, os carros elétricos ainda não se tornarão uma realidade de grande escala em tão curto prazo. Neste sentido, muitos especialistas defendem que o uso de biocombustíveis pode ser uma opção balanceada para aliar o aproveitamento da tecnologia existente a uma redução direta da pegada de carbono ligada ao setor.

O uso de misturas diesel-biodiesel e gasolina-etanol é um exemplo de sucesso que já vem sendo praticado há décadas no Brasil e em outros países, indicando que o uso de dois combustíveis simultaneamente pode não apenas oferecer uma transição suave de um presente fóssil para um futuro renovável, mas também proteger o mercado contra flutuações na oferta e demanda por meio da alteração de proporções nas misturas. Este cenário é particularmente benéfico em países como o Brasil, que dispõem de uma produção agrícola abundante e bem estabelecida.

Além da flexibilidade oferecida, o uso de dois combustíveis simultaneamente pode oferecer vantagens técnicas se realizado de maneira adequada. Mais do que simplesmente misturar duas substâncias diferentes, modos de operação específicos – como o chamado modo *dual fuel* – possuem o potencial de aumentar a eficiência de conversão energética no motor e reduzir a emissão de importantes poluentes. Todavia, uma vez que cada combustível possui uma característica própria que interfere diretamente na forma como pode ser mais bem aproveitado, entender o funcionamento de cada um deles – e de suas combinações – é fundamental.

Como será discutido ao longo do trabalho no item 3.2, algumas combinações de combustível no modo *dual fuel*, como diesel-gasolina e diesel-gás natural, já foram abordadas previamente na literatura, e muitas informações relevantes associadas a estes processos estão disponíveis. Porém, outras

combinações menos conhecidas, como as que envolvem HVO e outros combustíveis, não foram estudadas em trabalhos anteriores. Assim, a presente tese pretende, com dados experimentais e numéricos, preencher algumas destas lacunas, incrementando o conhecimento científico e tecnológico acerca da operação *dual fuel* utilizando combustíveis adaptáveis ao cenário energético brasileiro.

### **1.3 Estrutura do trabalho**

No Capítulo 1, é apresentada uma breve introdução sobre a situação atual dos transportes e combustíveis no Brasil, e são abordados os objetivos, a motivação e a relevância do presente trabalho. No Capítulo 2, são apresentados fundamentos referentes aos motores diesel, incluindo sua história, princípio operacional e relações geométricas. No Capítulo 3, são abordados alguns dos principais combustíveis utilizados em motores diesel, bem como os modos de operação mais relevantes. No capítulo 4, é apresentada a bancada experimental utilizada nos ensaios, incluindo a caracterização do motor, dos sensores e descrição do procedimento metodológico. No Capítulo 5 são abordados fundamentos da simulação computacional em motores diesel, incluindo as principais equações que governam o problema e alguns dos submodelos aplicados às modelagens zero e tridimensionais. No Capítulo 6, são apresentados os resultados experimentais e numéricos. Finalmente, no Capítulo 7, são apresentadas as conclusões principais do trabalho.

## 2 MOTORES DIESEL

### 2.1 Origem

Em 1892, o engenheiro alemão Rudolf Diesel apresentou uma nova forma de motor de combustão interna que viria a receber seu nome. Ao contrário de modelos anteriores, o sistema proposto não dependia de uma faísca para a ignição, que era alcançada por meio da injeção de um combustível líquido no cilindro preenchido com ar. Devido à presença do estágio de compressão, o ar se encontrava suficientemente quente para que a combustão tivesse início. A simples introdução deste novo conceito permitiu dobrar a eficiência em relação aos motores de combustão interna então existentes, ao mesmo tempo em que contornou os problemas de detonação e batida no motor (HEYWOOD, 2018a). Suas primeiras patentes trouxeram algumas das ilustrações iniciais do ciclo termodinâmico e da configuração mecânica (Figura 1) do que viria a ser conhecido como motor Diesel. Em 1897, o primeiro motor Diesel foi efetivamente operado pela Maschinenfabrik Augsburg, alcançando uma eficiência de 26,2%, valor notável para a época (MOLLENHAUER; TSCHOEKE, 2010). Uma linha do tempo detalhada do desenvolvimento dos motores Diesel pode ser encontrada no *Handbook of Diesel Engines*, de Mollenhauer e Tschoeke (2010).

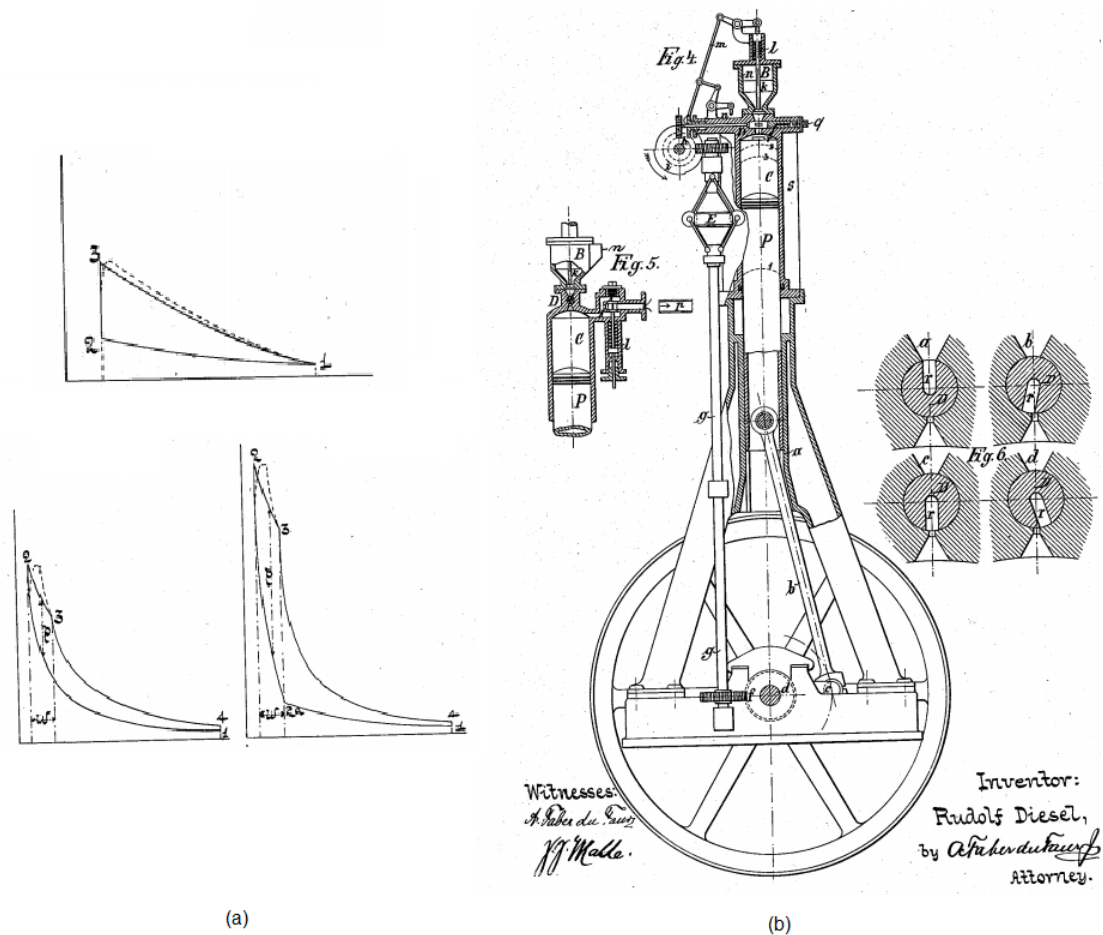


Figura 1: (a) esboços de Rudolf Diesel para ilustrar o ciclo termodinâmico do motor Diesel; (b) configuração mecânica simplificada do primeiro motor Diesel (DIESEL, 1895).

Desde então, muitas modificações foram propostas, algumas delas pelo próprio Rudolf Diesel (MOLLENHAUER; TSCHOEKE, 2010), e o foco deixou de se concentrar puramente na eficiência energética (RIMKUS; MELAIKA; MATIJOŠIUS, 2017). Todavia, o conceito original continua a ser amplamente utilizado e deve se manter assim pelas próximas décadas (HEYWOOD, 2018c).

## 2.2 Princípio de funcionamento

Os motores Diesel são motores térmicos que utilizam as propriedades de um gás para converter energia térmica em mecânica. Assim, a massa de ar contida num volume reduzido como o do interior do cilindro de um motor pode receber calor e conseqüentemente ocasionar um aumento na pressão do gás.

Esse aumento de pressão, por sua vez, pode ser utilizado para produção de trabalho mecânico, fornecendo a potência produzida pelo motor (BREEZE, 2018).

Motores de combustão interna podem ser classificados em diversas categorias, como de acordo com sua aplicação (veículos leves, veículos pesados, geração de potência, aviação), configuração básica (alternativos, rotativos), ciclo de trabalho (dois ou quatro tempos), característica das válvulas, combustível operado, método de ignição, entre outros (HEYWOOD, 2018b). As inúmeras configurações existentes tornam inviável o detalhamento de cada uma das possibilidades, de modo que o presente trabalho dará destaque apenas à configuração que aqui será estudada: motores alternativos, de ignição por compressão, de quatro tempos. As demais características referentes ao motor estudado, como configuração das válvulas e detalhes da geometria do cilindro, serão apresentadas na seção apropriada.

Em um motor Diesel a quatro tempos, o ciclo completo inclui admissão de ar, compressão, injeção de combustível, formação da mistura, ignição, expansão e exaustão (GUPTA; SHARMA; NARAYAN, 2016a). Estas etapas são ilustradas pela Figura 2, que representa o diagrama PV do ciclo Diesel e é bastante semelhante aos esboços iniciais apresentados por Rudolf Diesel (ver Figura 1).

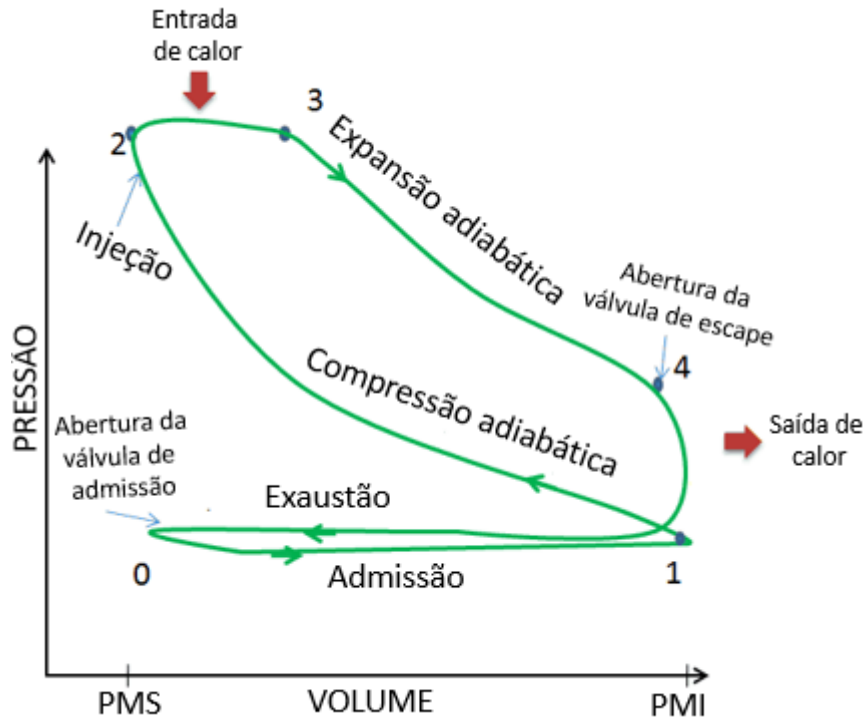


Figura 2: ilustração do diagrama PV do ciclo Diesel real (NuclearPower.net, 2024).

A primeira etapa, a admissão, começa quando a válvula de admissão é aberta e dura até seu fechamento, o que causa a compressão do ar a taxas comumente entre 14:1 e 22:1 (HEYWOOD, 2018a). A proporção com a qual o ar é comprimido é um parâmetro importante de cada motor, sendo denominada taxa de compressão ( $r_c$ ). Seu cálculo depende simplesmente da relação entre os volumes máximo (pistão no ponto morto inferior – PMI) e mínimo (pistão no ponto morto superior – PMS) da câmara de combustão.

### 2.3 Relações geométricas

Embora difiram em alguns aspectos, os motores Diesel possuem a mesma configuração básica e muitos de seus componentes são indispensáveis, independentemente do modelo. Na Figura 3 ilustra-se um motor Diesel simplificado, dando foco às principais dimensões e variáveis que são consideradas em seu projeto, dimensionamento e seleção.

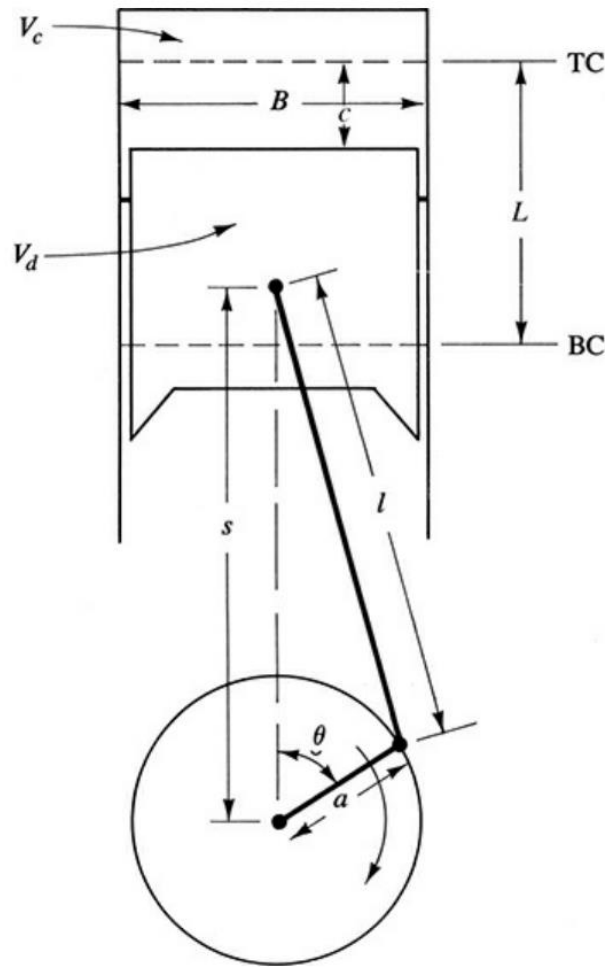


Figura 3: geometria básica e principais dimensões de um motor Diesel (HEYWOOD, 2018a).

Na Figura 3, o pistão realiza um movimento alternativo entre o PMS (quando o volume é mínimo e igual a  $V_c$ ) e o PMI (quando o volume é máximo e igual a  $V_d + V_c$ ). O volume deslocado é representado por  $V_d$ , que ocorre ao longo do curso do pistão ( $L$ ). O pistão possui diâmetro  $B$  e está distante do eixo da manivela a uma distância  $s$ , que pode ser calculada com base no comprimento da biela ( $l$ ), do comprimento ( $a$ ) e do ângulo da manivela ( $\theta$ ). Por fim, a variável  $c$  é utilizada para indicar a distância momentânea do pistão em relação ao PMS.

Como já mencionado, um dos parâmetros mais significativos de um motor é a sua taxa de compressão, definida pela Equação (1) (GUPTA; SHARMA; NARAYAN, 2016b).

$$r_c = \frac{\text{Volume máximo}}{\text{Volume mínimo}} = \frac{V_d + V_c}{V_c} \quad (1)$$



Com base nas dimensões apresentadas, na área do topo do cilindro ( $A_{ch}$ ), na área da coroa do pistão ( $A_p$ ) e da rotação do motor (N), uma série de novos parâmetros pode ser desenvolvida. Estas relações, sintetizadas na Tabela 1, demonstram a inter-relação entre a geometria de um motor e seu comportamento operacional.

Tabela 1: principais parâmetros e relações geométricas de um motor Diesel (HEYWOOD, 2018a).

Variável	Valores típicos	Relação matemática	Eq.
Relação diâmetro-curso	0.8-1.2 para motores pequenos e médios. 0.5 para motores Diesel grandes e lentos.	$R_{BS} = \frac{B}{L}$	(2)
Relação biela-manivela	3-3.5 para motores pequenos e médios. 5-9 para motores Diesel grandes e lentos.	$R_{BM} = \frac{l}{a}$	(3)
Volume instantâneo	$V_c < V_{inst} < (V_d + V_c)$	$V_{inst} = V_c + \frac{\pi \cdot B^2}{4} \cdot c$	(4)
Distância manivela-pistão	-	$s = a \cdot \cos \theta + (l^2 - a^2 \cdot \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}$	(5)
Distância instantânea PMS-pistão	$0 < c < L$	$c = \frac{L}{2} \cdot \left[ R_{BM} + 1 - \cos \theta - (R_{BM}^2 - \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} \right]$	(6)
Área instantânea da câmara de combustão	$A_{ch} + A_p < A_s < A_{ch} + A_p + \pi \cdot B \cdot L$	$A_s = A_{ch} + A_p + \pi \cdot B \cdot c$	(7)
Velocidade média do pistão	-	$\bar{S}_p = 2 \cdot L \cdot N$	(8)
Velocidade instantânea do pistão (real)	-	$S_p = \bar{S}_p \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \sin \theta \cdot \left[ 1 + \frac{\cos \theta}{(R_{BM} - \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}}} \right]$	(9)
Velocidade instantânea do pistão (simplificada)	-	$S_p = \bar{S}_p \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \sin \theta \cdot \left[ 1 + \frac{\cos \theta}{R_{BM}} \right]$	(10)
Aceleração instantânea do pistão	-	$a_p = \pi^2 \cdot \bar{S}_p \cdot N \cdot \left( \cos \theta + \frac{\cos 2\theta}{R_{BM}} \right)$	(11)

### **3 COMBUSTÍVEIS: PROPRIEDADES E MODOS DE OPERAÇÃO**

A crescente demanda por combustíveis automotivos tem imposto uma carga cada vez maior aos recursos fósseis e renováveis já existentes. O Brasil possui longa tradição no uso de fontes alternativas de energia que suprem parcialmente a demanda por combustíveis veiculares, tal como no uso de etanol e biodiesel, ao mesmo tempo em que respeitam preocupações ambientais e utilizam matérias-primas adaptáveis à realidade nacional. Em paralelo à introdução de combustíveis ambientalmente mais sustentáveis, melhorias nas tecnologias de conversão de energia dentro e fora do motor são igualmente importantes para atingir os padrões cada vez mais exigentes de eficiência e emissões. Neste contexto, um promissor modo de operação de motores é o chamado modo *dual fuel*, que une dois combustíveis diferentes de modo a aproveitar ao máximo as propriedades particulares a cada um deles.

#### **3.1 Combustíveis para motores Diesel**

##### **3.1.1 Diesel**

O diesel, obviamente, é o combustível mais usado nos motores de mesmo nome. No Brasil, é regulamentado pela Resolução ANP N°50/2013 (uso rodoviário) e pela Resolução ANP N° 45/2012 (uso não rodoviário), que abrangem classificações, regras para controle de qualidade e propriedades em geral (ANP, 2012; ANP, 2013). Na Tabela 2 apresentam-se algumas das principais especificações a serem seguidas pelo diesel comercial de uso rodoviário no Brasil, de acordo com a Resolução ANP N° 50.

Tabela 2: principais propriedades do diesel comercial no Brasil (ANP, 2013).

Característica	Unidade	Limite	
		Tipo A e B	
		S10	S500
Aspecto	-	Límpido e isento de impurezas	
Cor	-	Incolor/amarelado, podendo tender ao marrom alaranjado	Vermelho
Cor ASTM máx.	-	3,0	
Teor de biodiesel	% volume	De acordo com a legislação vigente, com variação permitida de 0,5% em volume	
Enxofre total	mg/kg	10,0 + 0,5	500
Massa específica a 20°C	kg/m <sup>3</sup>	815,0 a 850,0 – Tipo A 815,0 a 853,0 – Tipo B	815,0 a 865,0
Ponto de fulgor mín.	°C	38,0	
Viscosidade cinemática a 40°C	mm <sup>2</sup> /s	2,0 a 4,5	2,0 a 5,0
Ponto de entupimento a frio máx.	°C	Varia conforme localização geográfica e época do ano	
Cetanagem mín.		48	42
Estabilidade à oxidação	mg/100 ml	2,5	-
Índice de acidez	mg KOH/g	Deve ser anotado	
Lubricidade máx.	µm	Limite aplicável de 460 a 520 µm	
Condutividade elétrica mín.	pS/m	25	25

O diesel consiste em uma mistura de hidrocarbonetos de diferentes índices de carbono, composto por frações de parafinas (n-alcanos, iso-alcanos e ciclo-alcanos) e aromáticos (alquil-benzenos, indanos, tetralinas, naftalenos, diaromáticos e fenantrenos), variando principalmente entre 8 e 27 carbonos (SAZHIN et al., 2014). Embora sua composição varie significativamente de acordo com a região e a forma de processamento, costuma apresentar uma composição média próxima de 14 carbonos e 26 hidrogênios (PINTO et al., 2023a), além de comumente ser misturado a biocombustíveis em proporções definidas por regulamentações locais (DE SOUZA et al., 2022).

### 3.1.2 Biodiesel

O biodiesel é, ao lado do etanol de cana-de-açúcar, o combustível renovável de maior tradição no Brasil. Em 2021, todo diesel fóssil vendido em postos de combustível em território nacional deveria conter uma fração de 13% de biodiesel em volume, mesmo valor observado em 2023 (GOVERNO DO BRASIL, 2023). Embora esta fração tenha sido temporariamente reduzida para 11% pela ANP no fim de 2020 (ANP, 2020), em decorrência da pandemia do novo coronavírus, a perspectiva é que o biodiesel continue tendo participação crescente na matriz energética brasileira.

Embora a produção nacional deste biocombustível seja concentrada no óleo de soja, o Brasil registra produção em menor escala de biodiesel a partir de gorduras animais, óleo de algodão e óleo de fritura usado (ABIOVE, 2019). Atualmente, o biodiesel é majoritariamente produzido a partir do processo de transesterificação, que reage um óleo (como fonte de triglicerídeos) e um álcool (geralmente metanol ou etanol) na presença de um catalisador (como hidróxidos de sódio ou potássio), gerando, nas condições adequadas, um alquil éster (biodiesel) e glicerol bruto como subproduto (DE SOUZA et al., 2021). A reação genérica de transesterificação é ilustrada pela Figura 4.

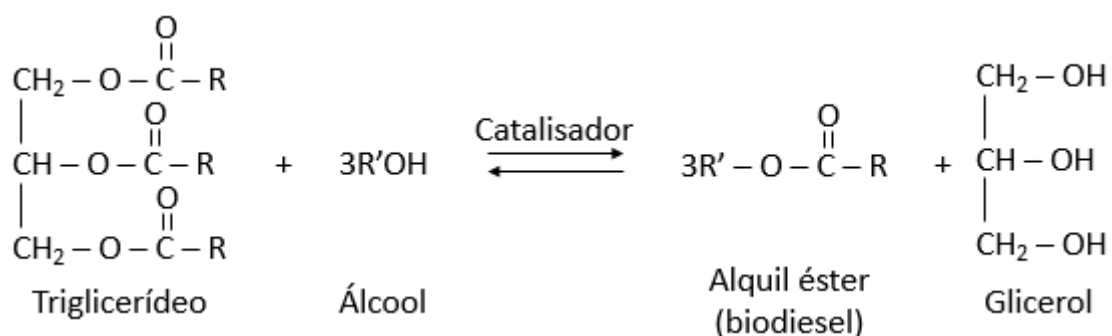


Figura 4: processo genérico de transesterificação (WIDAYAT; WIBOWO; HADIYANTO, 2013).

Por se tratar de uma mistura de alquil-ésteres proveniente de matérias-primas com diferentes distribuições de triglicerídeos, o biodiesel possui uma composição bastante dependente do modo como foi produzido. Esta diversidade reflete também nas propriedades do biodiesel, incluindo sua viscosidade, poder

calorífico, propriedades de queima e capacidade de armazenamento, bem como, em menor escala, sua massa específica (HOEKMAN et al., 2012).

Em geral, a mistura de biodiesel ao diesel confere maior ponto de ebulição, maior viscosidade, menor conteúdo energético por volume, maior número de cetano, melhor lubrificidade e pior resistência à oxidação (HEYWOOD, 2018a). Seu uso em motores diesel é frequentemente associado a menores emissões de material particulado, monóxido de carbono e hidrocarbonetos, enquanto um aumento na geração de NO<sub>x</sub> é comumente observado (MCCORMICK; ALLEMAN; YANOWITZ, 2010).

### **3.1.3 HVO**

O HVO, sigla em inglês para “óleo vegetal hidrotratado”, é um dos biocombustíveis mais promissores da atualidade, já sendo utilizado em países da Europa e nos Estados Unidos, e com potencial de produção em diversas outras regiões do globo (SOAM; HILLMAN, 2019). Este combustível renovável é produzido pela hidrogenação de óleos vegetais, resultando em um produto com propriedades de queima comparáveis e até superiores às do diesel fóssil. Seu processo produtivo, geralmente realizado a temperaturas de 300 a 450 °C e pressões de 3 a 20 MPa (LORENZI et al., 2020), pode também resultar em diferentes quantidades de biogasolina e querosene de aviação, a depender dos parâmetros operacionais e do catalisador (BEZERGIANNI; KALOGIANNI; VASALOS, 2009).

No processo de hidrotratamento de óleos vegetais, os triglicerídeos (principais compostos desta matéria-prima) são decompostos cataliticamente na presença de hidrogênio, que reage para formar hidrocarbonetos comparáveis ao diesel fóssil, principalmente heptadecano e octadecano (SOTELO-BOYAS; TREJO-ZARRAGA; JESUS HERNANDEZ-LOYO, 2012). As principais reações envolvidas são decarbonilação, decarboxilação e deoxigenação, conforme ilustrado pela Figura 5 para o caso do hidrotratamento de um triglicerídeo assumido como trioleína pura. O processo também resulta em propano e ácido esteárico (LORENZI et al., 2020).

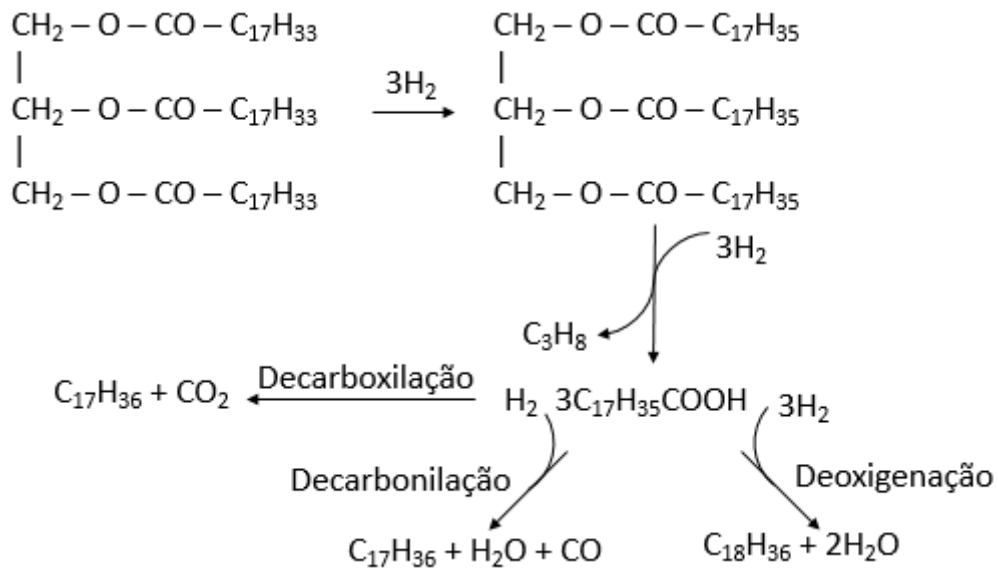


Figura 5: processo simplificado de hidrotratamento de trioleína para produção de HVO (heptadecano e octadecano) (LORENZI *et al.*, 2020).

Além de ser um combustível renovável perfeitamente capaz de substituir o diesel fóssil em motores de combustão interna, o HVO costuma apresentar elevado poder calorífico inferior – PCI (44.1 MJ/kg), alto número de cetano (>70) e menor massa específica (780 kg/m<sup>3</sup>) comparado ao diesel comercial. Em decorrência de suas propriedades favoráveis à combustão, diversos estudos experimentais indicaram que o uso de HVO em motores de combustão interna oferece vantagens em relação ao diesel fóssil, tais como maior eficiência e redução de poluentes importantes como NO<sub>x</sub>, CO e HC (DA COSTA *et al.*, 2022a). Na Tabela 3 apresenta-se um resumo de algumas das principais vantagens do HVO em relação ao diesel, conforme relatado em estudos recentes publicados na literatura científica.

Tabela 3: efeito do uso de HVO na performance e nas emissões de motores diesel (DE SOUZA et al., 2022).

Ref.	Tipo de análise	Efeitos do uso de HVO
(BORTEL; VÁVRA; TAKÁTS, 2019)	Emissões e eficiência de um veículo de passeio operando com HVO em misturas de 30-70% com diesel	A adição de HVO à mistura reduziu o consumo de combustível e as emissões de CO, CO <sub>2</sub> , HC, MP e NO <sub>x</sub> .
(SINGER et al., 2015)	Análise de emissões em misturas de biodiesel (metil éster) de colza com diesel e HVO	Redução nas emissões de CO, HC e MP em misturas que continham HVO como substituto para o diesel tradicional
(KIM et al., 2014)	Emissões e eficiência de um motor de pequeno porte alimentado por misturas de biodiesel e HVO	Misturas contendo HVO como substituto de biodiesel apresentaram menores emissões de HC e CO, assim como melhor eficiência e menor consumo de combustível
(KARAVALAKIS et al., 2016)	Uso de HVO e biodiesel de óleo de fritura em motores de grande porte para caminhão	Redução significativa nas emissões de CO <sub>2</sub> e NO <sub>x</sub> ao usar HVO em comparação com biodiesel
(VOJTISEK-LOM et al., 2017)	Combustão e emissões de diesel, biodiesel, HVO e suas misturas	Menores emissões de CO, HC e NO <sub>x</sub> e menor consumo de combustível para HVO em comparação com biodiesel Menor atraso de ignição, menor consumo de combustível,
(PECHOUT et al., 2019)	Carro Euro6 operando com HVO e biodiesel	menores emissões de CO <sub>2</sub> e N <sub>2</sub> O e praticamente zero emissões de metano associados ao uso de HVO

## 3.2 Combustíveis para modo *dual fuel*

### 3.2.1 Hidrogênio

Além de ser considerado um combustível limpo devido à não emissão de carbono durante sua queima (apenas água é liberada) (AKAL; ÖZTUNA; BÜYÜKAKIN, 2020), o hidrogênio possui a vantagem de possuir rotas produtivas adaptáveis a diversos cenários. Embora sua produção seja tradicionalmente realizada por meio da reforma de combustíveis fósseis como gás natural

(GUBAN et al., 2020), é possível produzir o mesmo combustível por caminhos alternativos, sendo exemplos a quebra termoquímica de biomassa (ROCHA et al., 2021), fotoeletrolise (SHEU et al., 2017) e processos biológicos (LIU et al., 2019), todos eles aplicáveis ao cenário nacional brasileiro.

A aplicação de hidrogênio em motores a combustão interna ainda não é uma realidade em grande escala e se concentra basicamente no campo da pesquisa. Seu futuro é promissor, apesar de parte da indústria automotiva, como a Volkswagen, ter recentemente se posicionado contra seu uso e em favor de carros elétricos (DE OLIVEIRA, 2021). O hidrogênio possui propriedades desejáveis de queima, como elevada difusividade, alta velocidade de chama e amplo limite de inflamabilidade (MENAA et al., 2019). Este mesmo combustível pode, todavia, apresentar problemas em sua queima em motores, tais como detonação (DHYANI; SUBRAMANIAN, 2020), pré-ignição (DEB et al., 2015) e batida (YE et al., 2020). Estes eventos prejudicam o ciclo ao reduzir a potência produzida pelo motor, e podem danificar até mesmo o sistema de admissão ao elevar a pressão na entrada de ar (MENAA et al., 2019).

Com todos os cuidados demandados pela aplicação de hidrogênio em motores de combustão interna, a forma de introdução deste combustível na entrada de ar é também parte importante para a correta operação do motor. Atualmente, os métodos existentes de introdução do hidrogênio são carburação (SARAVANAN; NAGARAJAN; NARAYANASAMY, 2008), injeção múltipla contínua (MENAA et al., 2019), injeção múltipla cronometrada (NAVALE; KULKARNI; THIPSE, 2017), injeção direta de baixa pressão (DARZI et al., 2018) e injeção direta de alta pressão (LI et al., 2020), cada qual com suas respectivas vantagens e desvantagens.

O primeiro destes métodos de injeção é o mais simples, não requerendo grandes modificações no motor e fornecendo uma mistura homogênea de ar e combustível, porém aumenta os riscos de detonação e pode causar uma redução na eficiência volumétrica e na produção de potência, mesmos problemas observados na injeção múltipla contínua. Estas desvantagens são contornadas ao se utilizar técnicas de injeção direta, que por sua vez exigem um cuidado maior na escolha e no projeto do injetor, bem como uma atenção especial na mistura hidrogênio-ar, uma vez que o tempo disponível é menor. A injeção



múltipla cronometrada, por sua vez, se bem projetada, é capaz de manter as vantagens da injeção direta e contornar sua desvantagem, não exigindo grandes modificações no equipamento e oferecendo menor risco de problemas na combustão do hidrogênio (MENAA et al., 2019).

### 3.2.2 Syngas

O syngas é um gás combustível proveniente da decomposição termoquímica de substâncias fósseis (XIONG et al., 2022) ou renováveis (YUE et al., 2016), cuja composição comumente apresenta quantidades mensuráveis de hidrogênio, monóxido de carbono e metano (WANG et al., 2022). Este combustível pode ser produzido a partir de diversas matérias-primas, inclusive aquelas de baixo custo como resíduos de esgoto e biomassa em geral (EVARISTO et al., 2021), o que o torna uma excelente fonte energética em muitas regiões do mundo.

Por meio de processos simples de gaseificação, é possível produzir gás combustível com considerável teor de hidrogênio (>15 %) e CO (> 20%), além de quantidades mensuráveis de metano e outros hidrocarbonetos (CORONADO; YOSHIOKA; SILVEIRA, 2011). A depender do processo de produção, a concentração de hidrogênio pode ultrapassar os 60%, e o teor de componentes inertes pode ser reduzido a uma porcentagem mínima, fazendo do syngas um combustível capaz de apresentar composições extremamente distintas (TIMOFEEVA et al., 2023). A composição de um syngas varia também conforme o regime de fluidização, direção do fluxo e agente gaseificante (XU et al., 2018).

Devido a seu potencial energético, o syngas já foi avaliado como substituto parcial do diesel em motores *dual fuel*. Um estudo conduzido por Sharma and Sahoo (2022) testou diferentes composições em um motor monocilindro de 5,2 kW, indicando que a máxima performance foi alcançada em carga parcial (67,9%) e com um syngas com alto teor de hidrogênio (72,4%). De forma semelhante, Olanrewaju et al. (2022), utilizaram um syngas composto por nitrogênio (48,02%), CO (20%) e hidrogênio (15%) em um motor monocilindro de 5,7 kW, observando que o uso deste combustível gasoso deslocou a taxa de liberação de calor para a etapa de expansão do cilindro, retardando o início da combustão, o pico de pressão no cilindro e a taxa máxima de liberação de calor.

Estudos semelhantes foram também apresentados por Rabello de Castro et al (2022), que avaliaram composições típicas de syngas como combustível em um motor operando sob diversas condições operacionais.

### 3.2.3 Gás natural

O gás natural é um combustível de origem fóssil, mas que possui potencial de reduzir os impactos ambientais do veículo quando comparado ao uso de combustíveis fósseis tradicionais (DAI; LASTOSKIE, 2014). Embora seus componentes possam variar, é majoritariamente composto por metano e menores quantidades de hidrocarbonetos de cadeia mais longa (GASMIG, 2019). No Brasil, não se encontra disponível em todo o território nacional, mas está disponível em gasodutos espalhados ao longo da costa brasileira, além de trechos atravessando estados como São Paulo, Mato Grosso do Sul, Paraná e Amazonas (EPE, 2023b).

Este combustível apresenta bons índices de emissão devido à baixa presença de enxofre e baixa emissão de fuligem. A composição média de um gás natural comercializado no Brasil é apresentada pela Tabela 4 (GASMIG, 2019). É possível observar que este gás possui uma pequena concentração de substâncias inertes, como CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>, sendo o restante composto por hidrocarbonetos de cadeia curta e alto poder calorífico.

Tabela 4: Composição média de um gás natural brasileiro (GASMIG, 2019).

Elemento	Composição
Metano (CH <sub>4</sub> )	88,5%
Etano (C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> )	6,2%
Propano (C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> )	2,2%
C <sub>4</sub> +	0,8%
CO <sub>2</sub>	1,8%
N <sub>2</sub>	0,5%

Devido à sua disponibilidade comercial e boas propriedades de queima, o gás natural já foi amplamente testado em motores *dual fuel* para operação com diesel. Em um estudo utilizando um motor monocilindro de 7.4 kW, Pinto et al. (2023) avaliaram o uso de gás natural veicular injetado no pórtico de admissão

sob várias taxas de substituição, indicando que a operação *dual fuel* com diesel, HVO e farnesano aumentou o atraso de ignição e reduziu a pressão no cilindro. O uso de gás natural foi capaz de reduzir as emissões de NO<sub>x</sub> em até 18.3%, de material particulado em até 83.1% e de CO<sub>2</sub> em até 13%, porém ocasionou um aumento significativo nas emissões de monóxido de carbono e hidrocarbonetos não queimados.

Em outros estudos, alguns dos mesmos resultados também foram verificados. Avaliando um motor diesel de seis cilindros e 247 kW, modificado para operação *dual fuel* com gás natural, Liu et al. (2021) identificaram que a maior presença de gás natural esteve associada a um maior atraso na combustão e a uma menor pressão no interior do cilindro, além de reduzir as regiões de alta temperatura. De modo similar, um motor *dual fuel* ótico foi testado por Zhu et al. (2022) com diesel e gás natural, indicando que o uso de maiores frações deste combustível secundário está associado a um maior atraso de ignição e menores picos de pressão.

### **3.2.4 Biogás**

O biogás é um combustível gasoso e renovável produzido pela fermentação anaeróbica da biomassa (MAGHANAKI et al., 2013). Devido à flexibilidade de seu processo produtivo, pode utilizar diversas matérias-primas, inclusive resíduos, o que o torna um combustível de baixo-custo, viável em pequena escala e adaptável a diversas regiões do mundo (SINGH; KALAMDHAD, 2022).

A composição do biogás varia fortemente com sua forma de produção e com a matéria-prima utilizada, mas a maior parte de sua parcela combustível é composta por metano (PINTO et al., 2023a). Além disso, também são comumente observadas quantidades significativas de CO<sub>2</sub>, além de menores frações de N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>S e NH<sub>3</sub> (CALBRY-MUZYKA et al., 2022). A presença excessiva de H<sub>2</sub>S é motivo de preocupação para operações de combustão devido ao elevado risco de corrosão nas superfícies do equipamento (ABD et al., 2021), mas esta substância pode ser removida por meio de processos de pós-tratamento (MULU et al., 2021). Da mesma forma, a concentração de metano pode ser aprimorada por meio do chamado *upgrading* do biogás, que remove

impurezas (principalmente CO<sub>2</sub>) para produzir o chamado biometano, um metano de alta pureza produzido a partir de fontes renováveis (AGHEL et al., 2022).

O uso de biogás em motores diesel no modo *dual fuel* já foi abordado em muitos estudos. Pinto et al. (2023a) avaliaram a combustão *dual fuel* de biogás com diesel fóssil e renovável em um motor monocilindro de 7.4 kW, relatando que o aumento da concentração de biogás resultou em aumento proporcional do atraso de ignição, além de reduções na pressão do cilindro, emissões de NO<sub>x</sub> e emissões de material particulado. Todavia, foi reportado um aumento das emissões de CO e hidrocarbonetos não queimados. De maneira semelhante, Bora et al. (2022) avaliaram a operação *dual fuel* de diesel e biogás em um pequeno motor de testes com um cilindro de 3,5 kW. Os autores observaram que a operação *dual fuel* causou um maior atraso de ignição, uma menor pressão de combustão, e um deslocamento da liberação de calor em direção à etapa de expansão do cilindro, sendo que estes efeitos puderam ser reduzidos por meio do aumento da razão volumétrica de compressão. A operação de biogás em motores *dual fuel* também foi avaliada por de Souza et al. (2023), que relataram que o aumento da concentração de metano no biogás ocasionou um aumento das emissões de NO<sub>x</sub> e hidrocarbonetos não queimados, além de uma redução no atraso de ignição.

### 3.2.5 Biometano

Biometano é o nome dado a um gás combustível, de origem biológica, cujo teor de metano é alto o suficiente para se aproximar do gás natural. Este gás, cuja composição aceitável pode variar conforme a legislação local, possui qualidade superior ao biogás, uma vez que apresenta quantidades menores ou desprezíveis de substâncias que prejudicam a combustão, tais como CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>S (CALBRY-MUZYKA et al., 2022). Devido à sua composição rica em metano, pode se beneficiar de tecnologias já desenvolvidas para o gás natural.

A forma mais comum de obtenção do biometano é o chamado *upgrading* do biogás, em que um biogás é “filtrado” para remover compostos indesejados, principalmente CO<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>S. Esta denominação genérica abrange diversos

processos de separação, tais como absorção, adsorção, separação por membranas, separação criogênica, separação biológica, e captura e armazenamento de carbono. Embora os custos de processamento sejam relativamente altos e acabem por elevar o preço final do biometano, existem opções de *upgrading* de baixo custo, englobando processos de filtragem com materiais econômicos como argila, cinzas, resíduos de biomassa, e minerais porosos, como zeólitos (DE SOUZA et al., 2023).

### **3.3 Modos de operação**

Desde a concepção dos primeiros modelos de motor a combustão por compressão, muitos modos de operação e técnicas de combustão foram propostos e implementados com o intuito de aprimorar parâmetros relativos à operação do motor, tais como eficiência da combustão, consumo específico de combustível e emissões de poluentes. A seguir, algumas das principais tecnologias e modos de operação atualmente utilizados em motores Diesel são apresentados e discutidos brevemente. Embora alguns destes modos de operação possam ser também aplicados em motores a gasolina, o foco será mantido em motores de ignição por compressão por serem o foco deste trabalho.

#### **3.3.1 Combustão pré-misturada**

Na combustão pré-misturada, o combustível é misturado ao ar com antecedência, de modo a garantir a homogeneidade da massa ar-combustível a ser queimada no interior do cilindro. Essas misturas geralmente operam próximas à estequiometria e podem ser formadas tanto na linha de admissão de ar como no interior do cilindro durante a etapa de admissão (injeção direta). Uma vez comprimida pelo movimento do pistão, a mistura é queimada com auxílio de uma centelha, que inicia a combustão e fornece potência ao motor. Este método de combustão é típico de motores a gasolina (DONG, 2018).

Neste tipo de motor, alguns dos problemas mais comuns são o risco de batida e ignição de superfície, também chamada de batida causada por temperatura superficial. Em motores Otto, uma vez que a combustão pré-misturada acontece ao ser iniciada por uma centelha, qualquer outra fonte de calor equivalente pode desencadear a queima no momento incorreto. Essa queima não programada causa picos de pressão no interior do cilindro e pode

levar a sérios danos ao motor. Batidas podem ocorrer repetidamente ao longo dos ciclos, o que pode ser contornado por meio de um atraso na centelha. Já a ignição de superfície ocorre quando existe algum ponto quente no interior do cilindro, e pode causar tanto uma ignição adiantada (pré-ignição) como retardada (pós-ignição) em relação à centelha. Alguns tipos menos comuns de batida podem também ser causados por vazamento de óleo de lubrificação para a câmara de combustão (HEYWOOD, 2018a). Na Figura 6 mostra-se o efeito da batida sobre a curva de pressão no interior do cilindro, o que evidencia o risco de danos ao sistema decorrente da combustão não controlada.

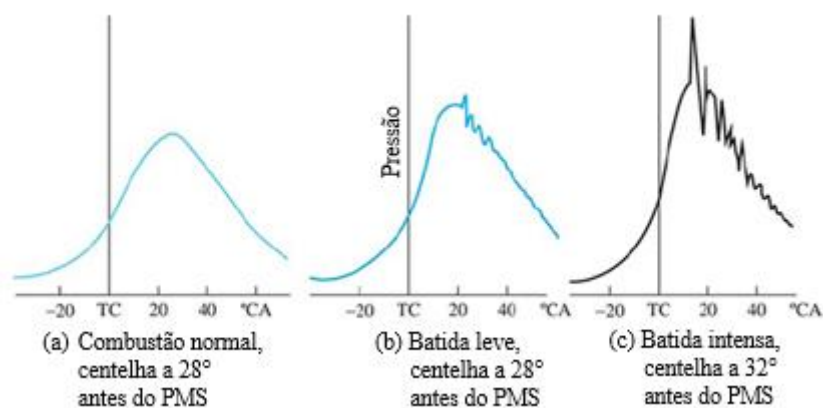


Figura 6: curvas de pressão em motores com combustão normal e com batida (HEYWOOD, 2018a).

### 3.3.2 Combustão não pré-misturada

Ao contrário da combustão pré-misturada, a combustão não pré-misturada apenas introduz o combustível no momento da combustão. Esta variante admite apenas ar ao cilindro, que é posteriormente comprimido a fim de elevar a temperatura acima do ponto de ignição do combustível a ser injetado. Muito comum em motores Diesel, esta técnica de combustão está associada a menores velocidades de chama, o que ocorre devido ao fato de a mistura não ser homogênea. Ao contrário da rápida chama de pré-mistura dos motores a gasolina, as chamas de difusão dos motores Diesel levam mais tempo para cobrir as mesmas distâncias (DONG, 2018).

### 3.3.3 Modo HCCI

No chamado modo HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*, na sigla em inglês), uma carga homogênea contendo a mistura ar-combustível é injetada na admissão ou prematuramente no cilindro, ocorrendo a ignição em decorrência do contato com um ambiente a temperatura e pressão suficientemente altas (JIN; ZHENG, 2015). Em geral, os motores Diesel costumam apresentar menores emissões de monóxido de carbono e hidrocarbonetos e maiores emissões de óxidos de nitrogênio quando comparados aos motores a gasolina. Neste sentido, o modo HCCI adota similaridades com ambos os tipos de motor, utilizando a carga pré-misturada do motor a gasolina e a ignição por compressão do motor Diesel, a fim de reduzir significativamente as emissões de NO<sub>x</sub> e material particulado ao mesmo tempo em que pode garantir uma elevada eficiência de conversão ao motor (KAMARUDDIN; WAHID; SIES, 2012).

Neste modo, a homogeneidade da mistura combustível é essencial, sendo que diversos estudos são focados exclusivamente em garantir que tal condição seja atingida. De fato, tais estudos demonstram que a homogeneidade da mistura é essencial na definição do comportamento do processo de combustão, de tal modo que a injeção de combustível na admissão deve receber atenção especial em motores HCCI. Mostra-se na Figura 7 um exemplo de sistema de injeção que assegura uma boa mistura do combustível com o ar a fim de atingir as condições físicas exigidas por este modo (KUMANO; YAMASAKI; IIDA, 2007).

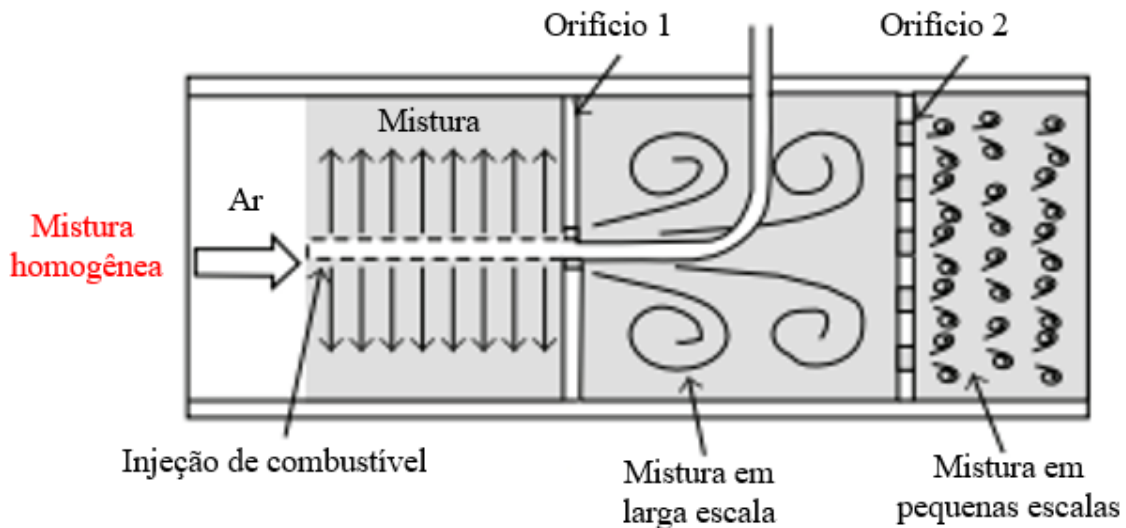


Figura 7: exemplo de sistema de formação de mistura homogênea em motores HCCI (KUMANO; YAMASAKI; IIDA, 2007).

Conforme já mencionado, a injeção do combustível pode ocorrer também no interior do cilindro, porém com certo avanço a fim de garantir a homogeneidade da mistura antes do início da combustão. Há ainda a possibilidade de o combustível ser injetado tanto no interior do cilindro como na admissão, constituindo uma junção das duas variantes de injeção em motores HCCI (KASHDAN; DOCQUIER; BRUNEAUX, 2004).

### 3.3.4 Modo *dual fuel*

A combustão *dual fuel*, como o próprio nome faz supor, está associada ao uso conjunto de dois combustíveis diferentes durante a operação do motor. No caso de motores de ignição por compressão, esta técnica permite o controle do tempo de combustão ao variar a proporção de cada combustível injetado, bem como o uso de modos avançados de combustão a altas cargas, uma vez que cada combustível pode entrar em combustão em momentos diferentes de modo a evitar um pico único de pressão, o que age como fator limitante em muitos casos (KASSA; HALL, 2018).

O modo *dual fuel* em motores diesel já foi testado principalmente utilizando diesel fóssil como combustível piloto (para iniciar a combustão), com outros combustíveis como gás natural liquefeito, gás natural comprimido e gás liquefeito de petróleo. De um modo geral, estes testes resultaram em menores



emissões de NO<sub>x</sub> e MP (material particulado), porém elevaram as emissões de HC e CO (PHAM et al., 2022). Todavia, como será discutido pelos próprios resultados apresentados nessa tese, a redução ou o aumento de determinado poluente durante a operação *dual fuel* estarão fortemente associados aos parâmetros operacionais do motor e às características físico-químicas dos combustíveis envolvidos, de modo que a tendência apresentada acima não necessariamente será sempre seguida.

A fim de controlar a combustão de maneira correta, um dos aspectos mais importantes da operação *dual fuel* é a injeção, que pode variar quanto à localização (na admissão ou diretamente na câmara de combustão), quanto ao tempo e quanto ao número (HALL; KASSA, 2021). Para o caso do gás natural, o mais comum é utilizar uma injeção na admissão, no que se refere como “modo *dual fuel* convencional” (ou CDF, do inglês “*Conventional Dual fuel*” ou “*Dual fuel* convencional”). Todavia, outros modos mais complexos, como o RCCI (*Reactivity Controlled Compression Ignition*), passaram a ser utilizados em um passado mais recente. No modo RCCI, o combustível secundário também é injetado na admissão, mas a diferença é que o diesel é injetado mais cedo que no modo *dual fuel* convencional. Desta forma, a injeção de diesel é encerrada antes que a combustão seja iniciada, e a combustão é regida principalmente pela cinética química. Por fim, o modo HPDI (*High Pressure Direct Injection*), no qual ambos os combustíveis envolvidos na operação *dual fuel* são injetados diretamente na câmara de combustão, também pode ser mencionado. Os principais modos de injeção *dual fuel* são ilustrados na Figura 8, produzida por Indrajana et al. (2018), na qual a região em azul representa a injeção do combustível primário, a região em verde representa a injeção do combustível secundário e a região em vermelho representa a duração da combustão.

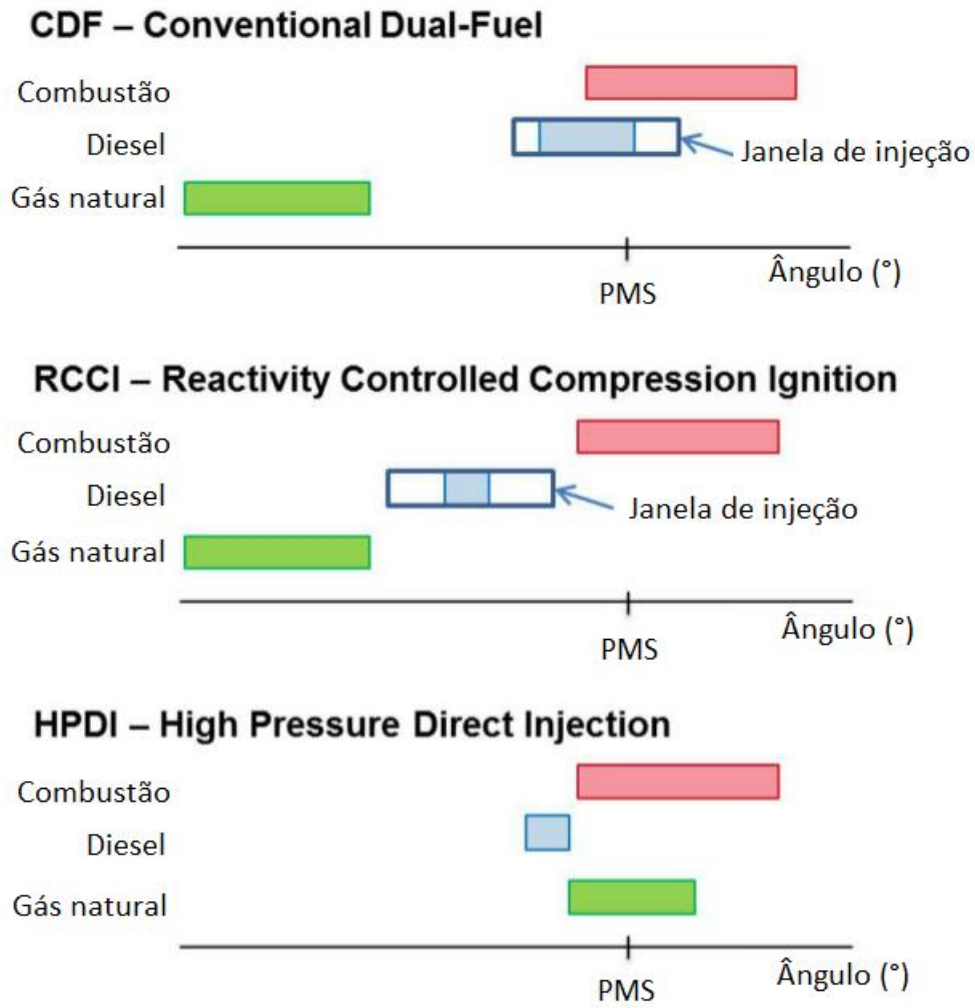


Figura 8: principais modos de injeção na operação *dual fuel* com gás natural (INDRAJUANA et al., 2018b).

## 4 BANCADA EXPERIMENTAL E ANÁLISE DE DADOS

Neste capítulo apresenta-se a bancada experimental utilizada no presente trabalho, bem como a especificação do motor e dos sensores, além das modificações necessárias para operação *dual fuel*. É apresentada também a metodologia para processamento de resultados, que permite partir de dados obtidos experimentalmente e prosseguir ao levantamento das curvas de pressão, estimativas de temperatura, análise da combustão e normalização das emissões de poluentes.

### 4.1 Bancada experimental

Os testes foram realizados em um motor diesel monocilindro Buffalo BFDE 10.0, naturalmente aspirado e estacionário, que visa representar aplicações de pequenas máquinas agrícolas ou para fim de geração distribuída. Na Tabela 5 apresentam-se algumas das principais características associadas ao motor utilizado no presente estudo.

Além do motor e seus componentes, a bancada de testes é composta por diversos sensores que monitoram parâmetros como temperatura, pressão, umidade e vazão em diferentes pontos. A Tabela 6 apresenta informações referentes aos sensores utilizados, incluindo medidor angular ótico (Figura 9), que correlaciona a pressão do cilindro à posição do virabrequim, e o analisador de gases (Figura 10), que registra as emissões dos principais poluentes controlados, como CO, CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, hidrocarbonetos e fumaça.

Tabela 5: Principais especificações do motor Buffalo BFDE 10.0 (DA COSTA, 2021).

<i>Parâmetro</i>	<i>Característica de operação</i>
<i>Fabricante / Modelo</i>	<i>Buffalo / BFDE 10.0</i>
<i>Tipo</i>	Ignição por compressão de quatro tempos
<i>Número de cilindros</i>	1
<i>Volume deslocado (V<sub>d</sub>)</i>	418 cm <sup>3</sup>
<i>Diâmetro do cilindro (B)</i>	86 mm
<i>Curso do pistão (L)</i>	72 mm
<i>Comprimento da biela (l)</i>	118 mm
<i>Raio do virabrequim (a)</i>	38 mm
<i>Relação volumétrica de compressão (rc)</i>	19,0:1
<i>Número de válvulas</i>	1 de admissão, 1 de exaustão
<i>Diâmetro válvula admissão/exaustão</i>	36 mm / 29 mm
<i>Aspiração</i>	Naturalmente aspirado
<i>Refrigeração</i>	Ar
<i>Injeção de combustível</i>	Direta acionada por bomba mecânica
<i>Injetor</i>	4 furos
<i>Ângulo de injeção</i>	22°±1° antes do PMS
<i>Pressão de injeção</i>	19,6 MPa
<i>Lubrificação</i>	Óleo SAE 15W-40
<i>Sistema de pós tratamento</i>	-
<i>Potência máxima</i>	7,1 kW @ 3600 rpm
<i>Torque máximo</i>	27 Nm @ 2800 rpm



Figura 9: medidor angular AVL Indimicro.

Tabela 6: Descrição dos sensores utilizados na bancada experimental.

Variável	Brand	Tipo de sensor	Modelo	Range	Incerteza
<i>Torque</i>	Intechno	Dinamômetro hidráulico	MD-04	0 – 30 Nm	±0,01
<i>Pressão no cilindro</i>	AVL	Piezelétrico	GH14DK	0 – 300 bar	±0,3% FS
<i>Ângulo do virabrequim</i>	AVL	Encoder óptico	AVL 365	-	< ±0,03°
<i>Rotação do motor</i>	AVL	Encoder óptico	AVL 365	50-20,000	±3rpm
<i>Lambda (<math>\lambda</math>)</i>	Fueltech	Sensor banda larga	Bosch 4.2	0.65-8.0	±0,009
<i>Vazão de ar</i>	Bosch	Thermal	HFM 5	8-480 kg/h	<±1,0%
<i>NO<sub>x</sub></i>	NAPRO	Analizador de gases	PC Multigas	0-5,000 ppm	±4,0%
<i>HC</i>	NAPRO	Analizador de gases	PC Multigas	0-20,000 ppm	±3,0%
<i>CO</i>	NAPRO	Analizador de gases	PC Multigas	0-15 %vol	±2,5%
<i>CO<sub>2</sub></i>	NAPRO	Analizador de gases	PC Multigas	0-20 %vol	±2,5%
<i>Opacidade</i>	Altanova	Opacímetro	Smoke Check 2000	0-9.99 m <sup>-1</sup>	±0,5%
<i>Temperatura ambiente</i>	TC	Termorresistência	PT100	0-650 °C	±0,8%
<i>Pressão barométrica</i>	Vectus	Analógico	7450	800-1200 mbar	±1,0%
<i>Umidade</i>	Humirel	Piezorresistivo	HPP811B002	0-100 %	±3,0%
<i>Pressão de admissão</i>	Bosch	Piezorresistivo	0281002437	0-5 bar	±0,1%
<i>Temperatura de admissão</i>	TC	Termorresistência	PT100	0-650 °C	±0,8%
<i>Pressão de escape</i>	Sabi Control	Piezorresistivo	SBTP	0-2 bar	±0,1% FS
<i>Temperatura de escape</i>	TC	Termopar	Type K	0-1372	±1,1%
<i>Temperatura do óleo</i>	TC	Termopar	Type K	0-1372	±1,1%

A Figura 11 ilustra um esquema simplificado da bancada de testes. Como pode ser observado na figura, o motor é alimentado com diesel ou HVO e, em caso de operação *dual fuel*, também com um combustível secundário a ser selecionado. O combustível secundário é injetado na linha de admissão, próximo à válvula de admissão, através de um injetor. Já o diesel é injetado diretamente no interior da câmara de combustão com o ar (ou mistura ar-combustível) já comprimido, assim como ocorre em um motor diesel convencional. O controle de carga é feito por meio de um dinamômetro. Para os testes deste estudo, foi selecionado um torque constante de 10 N.m e uma rotação fixada em 1800 rpm.

O ar foi admitido através de um filtro e de uma caixa de equilíbrio de pressão, a fim de evitar impurezas e flutuações. Por fim, a contrapressão de escape foi mantida em 100 mbar de modo a manter uma uniformidade nos testes.



Figura 10: analisador de gases PC Multigás.

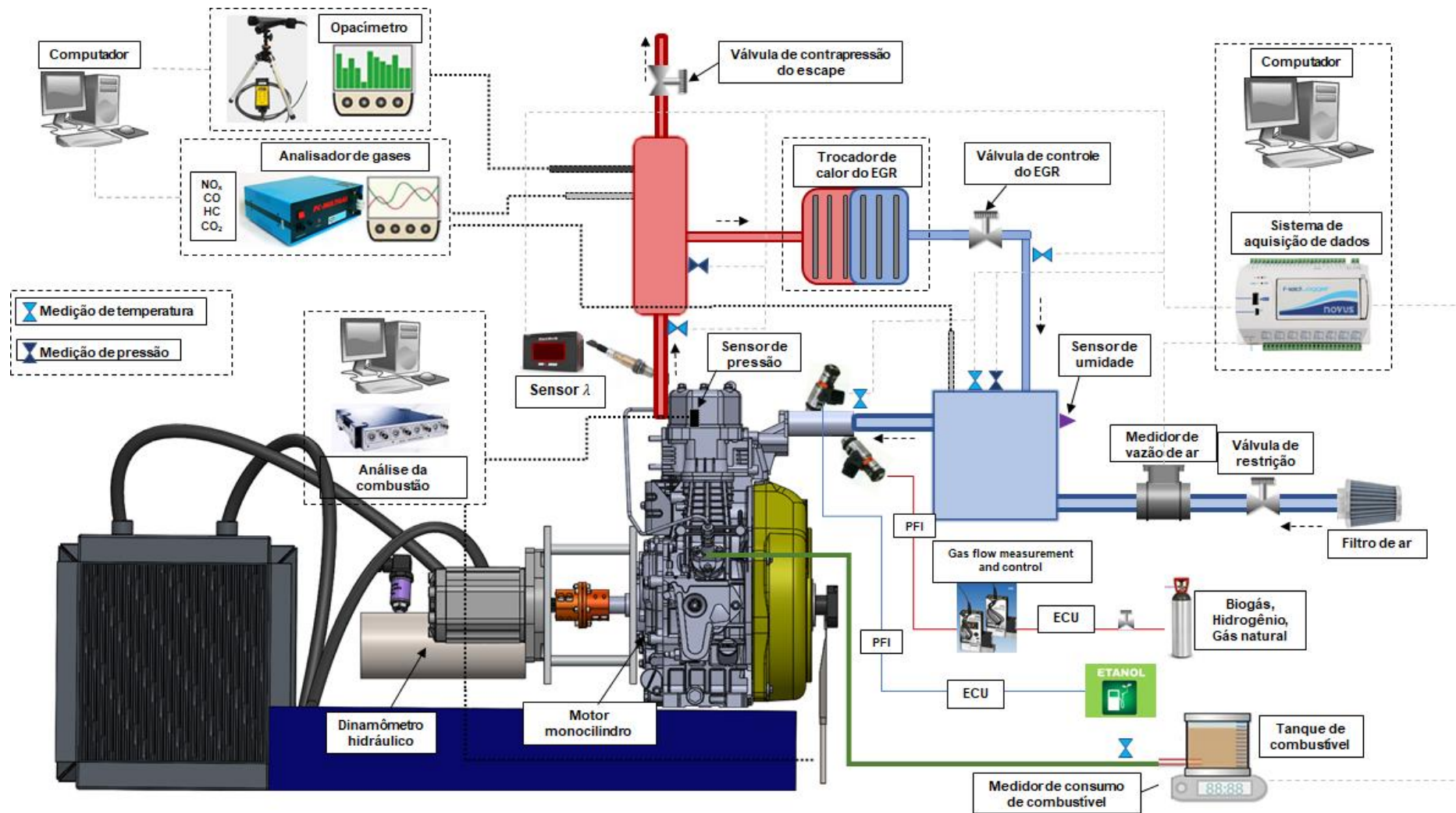


Figura 11: esquema de montagem da bancada de testes do LMT-UNIFEI. Adaptada de (DA COSTA et al., 2021).

Finalmente, o controle da injeção de combustíveis gasosos (secundários) foi realizado por meio de um medidor/controlador de vazão modelo Aalborg DPC. O medidor, apresentado na Figura 12, foi conectado a um cilindro de alta pressão, que por sua vez continha o gás a ser injetado na linha de admissão do motor. A saída do cilindro foi ajustada para operar a uma baixa pressão (aproximadamente 3 bar) a fim de evitar que o regulador de vazão operasse com um elevado gradiente de pressão. Como dado de entrada para o regulador, a composição do gás operado pode ser inserida diretamente no equipamento, que associa a diferença de pressão em sua entrada e saída a dados termodinâmicos em sua base de dados a fim de calcular e controlar o fluxo mássico.



Figura 12: medidor/controlador de vazão de gases Aalborg DPC (AALBORG, 2020).

A bancada experimental já montada e preparada para os testes é apresentada pela Figura 13.



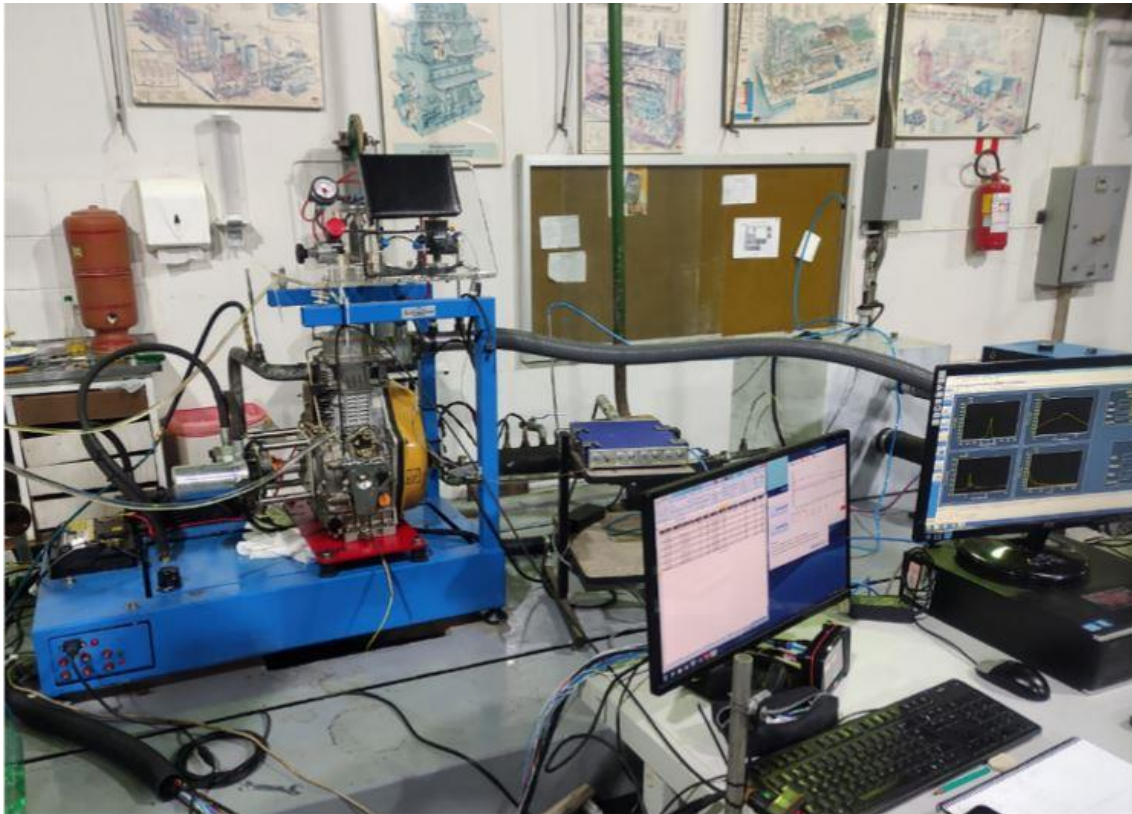


Figura 13: bancada experimental para testes *dual fuel* no LMT-UNIFEI (DA COSTA et al., 2022).

## 4.2 Cálculos preliminares

O primeiro parâmetro relevante calculado é a potência de eixo do motor. Visto que a carga e a rotação foram mantidas constantes durante todo o experimento, a potência será a mesma para todos os pontos.

A potência é dada pela Equação (12):

$$Pot = Torq \cdot \omega = 10 \cdot 1800 \cdot \frac{2 \cdot \pi}{60} = 1,885 \quad (12)$$

Na Equação (12), Torq é o torque em N.m e  $\omega$  é a rotação do motor em radianos por segundo.

Em seguida, a vazão do combustível primário (diesel) foi calculada a partir dos valores de lambda e das relações ar-combustível estequiométricas para os combustíveis consumidos pelo motor. Desta forma, na Equação (13) apresenta-se o procedimento para obtenção da vazão de combustível primário.

$$\dot{m}_{diesel} = \frac{\dot{m}_{ar} - \dot{m}_{comb,sec} \cdot AFe_{comb,sec} \cdot \lambda}{AFe_{diesel} \cdot \lambda} \quad (13)$$

Na Equação (13),  $\dot{m}_{diesel}$  é a vazão de diesel,  $\dot{m}_{ar}$  é a vazão de ar,  $\dot{m}_{comb,sec}$  é a vazão do combustível secundário,  $\lambda$  é o fator lambda e AFe é a relação ar-combustível na estequiometria.

A taxa de substituição de energia pelo combustível secundário é calculada por uma proporção simples, levando em conta a vazão e o PCI de ambos os combustíveis envolvidos, como apresentado pela Equação (14):

$$EF = \frac{\dot{m}_{comb,sec} \cdot PCI_{comb,sec}}{\dot{m}_{comb,sec} \cdot PCI_{comb,sec} + \dot{m}_{diesel} \cdot PCI_{diesel}} \quad (14)$$

onde EF é a substituição energética,  $PCI_{comb,sec}$  é o PCI do combustível secundário e  $PCI_{diesel}$  é o PCI do diesel.

A eficiência térmica do motor (*Brake Thermal Efficiency*, BTE) é dada pela relação entre o potencial energético teórico do combustível e a potência efetivamente transmitida pelo eixo, conforme Equação (15):

$$BTE = \frac{Pot[kW]}{\dot{m}_{comb,sec} \cdot PCI_{comb,sec} + \dot{m}_{diesel} \cdot PCI_{diesel}} \quad (15)$$

Uma vez conhecidas todas as vazões envolvidas na operação do motor, pode-se calcular a vazão de exaustão sem a necessidade de uma medição direta, conforme a Equação (16):

$$\dot{m}_{exh} = \dot{m}_{ar} + \dot{m}_{diesel} + \dot{m}_{comb,sec} \quad (16)$$

A pressão parcial de vapor da água contida no ar ( $p_{vapor}$ ), que posteriormente será utilizada para o cálculo de outros parâmetros relativos à operação do motor, depende da umidade relativa do ar e é dada pela Equação (17);

$$p_{vapor} = p_{sat} \frac{UR}{100} \quad (17)$$

Na Equação (17), UR é a umidade relativa do ar em % e  $p_{sat}$  é a pressão de saturação do vapor de água em Pa, que utiliza a formulação de Wexler (WEXLER, 1976) conforme apresentado por da Costa (2021) na Equação (18):

$$p_{sat} = e^{F(7) \cdot \ln(T_{amb}) + \sum_{j=0}^6 F(j) \cdot (T_{amb})^{(j-2)}} \quad (18)$$

onde  $F(0) = -0,29912729 \cdot 10^4$ ,  $F(1) = -0,60170128 \cdot 10^4$ ,  $F(2) = 0,1887643854 \cdot 10^2$ ,  $F(3) = -0,28354721 \cdot 10^{-1}$ ,  $F(4) = 0,17838301 \cdot 10^{-4}$ ,  $F(5) = -0,84150417 \cdot 10^{-9}$ ,  $F(6) = +0,44412543 \cdot 10^{-12}$  e  $F(7) = +0,28584870 \cdot 10^1$ .

Uma vez calculada a pressão de vapor, pode-se calcular o fator Ha, que representa a umidade absoluta do ar de admissão (gramas de água por kg de ar seco) e é dado pela Equação (19):

$$Ha = \frac{M_{H_2O}}{M_{ar}} \cdot \left( \frac{p_{vapor}}{p_{amb} - p_{vapor}} \right) \cdot 10^3 \quad (19)$$

Na Equação (19),  $M_{H_2O}$  e  $M_{ar}$  representam as massas molares da água (18,01534 kg/kmol) e do ar (28,965 kg/kmol), respectivamente. Finalmente, a vazão de ar seco é calculada pela Equação (20):

$$\dot{m}_{ar\ seco} = \frac{\dot{m}_{ar}}{1 + Ha \cdot 10^{-3}} \quad (20)$$

Outro parâmetro importante a ser calculado é a massa específica dos gases de exaustão, que evidentemente está diretamente associada à sua composição. Desta forma, o primeiro passo é calcular a composição percentual de cada um dos principais elementos presentes na mistura combustível, i.e. carbono, hidrogênio e oxigênio. Este valor é dado pela Equação (21), onde %E é a porcentagem do elemento E na mistura, no diesel ou no combustível secundário:

$$\%E_{mistura} = \frac{\dot{m}_{diesel} \cdot \%E_{diesel} + \dot{m}_{comb,sec} \cdot \%E_{comb,sec}}{\dot{m}_{diesel} + \dot{m}_{comb,sec}} \quad (21)$$

Em seguida, os fatores  $f_{f,w}$  e  $k_{w,r}$  são calculados conforme as Equações (22) e (23). O fator  $f_{f,w}$  é um fator específico do combustível para o cálculo do escoamento do gás de exaustão em via úmida, e  $k_{w,r}$  é o fator de correção de seco a úmido, ambos definidos pela norma ABNT NBR 8178-1, que compartilha o conteúdo da norma ISO de mesmo número (ABNT, 2012).

$$f_{f,w} = 0.055594 \cdot \%H_{mistura} + 0.0070046 \cdot \%O_{mistura} \quad (22)$$

$$k_{w,r} = 1.008 \cdot \left[ 1 - \frac{1.2442 \cdot (H_f + H_a) + 111.19 \cdot \%C_{mistura} \cdot \left( \frac{\dot{m}_{diesel} + \dot{m}_{comb,sec}}{\dot{m}_{ar seco}} \right)}{773.4 + 1.2442 \cdot (H_f + H_a) + f_{f,w} \cdot \left( \frac{\dot{m}_{diesel} + \dot{m}_{comb,sec}}{\dot{m}_{ar seco}} \right) \cdot 10^3} \right] \quad (23)$$

Finalmente, a massa específica dos gases de exaustão pode ser calculada a partir de sua composição e dos parâmetros  $k_{i,w}$  e  $k_{w,r}$  já obtido, conforme a Equação (24):

$$\rho_{exaustão} = \frac{10^3 + (H_f + H_a) + \left( \frac{\dot{m}_{diesel} + \dot{m}_{comb,sec}}{\dot{m}_{ar seco}} \right) \cdot 10^3}{773.4 + 1.2434 \cdot (H_f + H_a) + k_{f,w} \cdot \left( \frac{\dot{m}_{diesel} + \dot{m}_{comb,sec}}{\dot{m}_{ar seco}} \right) \cdot 10^3} \quad (24)$$

### 4.3 Análise da combustão

Um dos resultados mais relevantes obtidos experimentalmente são as curvas de pressão no cilindro em função do ângulo do virabrequim. A partir destas informações, é possível estimar as curvas que representam a taxa de liberação de calor aparente no motor, a partir das quais uma análise de combustão pode ser realizada. O método para obtenção da curva de taxa de liberação de calor (também chamada curva HRR, do inglês *heat release rate*) se inicia com a primeira lei da termodinâmica, conforme a Equação (25), na qual  $\frac{dQ}{dt}$  é a parcela de variação da transferência de calor de/para o sistema,  $P \frac{dV}{dt}$  é a parcela referente à deformação das fronteiras,  $\sum_i \dot{m}_i h_i$  é o balanço de fluxos

entálpicos através do sistema, e  $\frac{dU}{dt}$  é a variação temporal de energia interna (HEYWOOD, 2018a).

$$\frac{dQ}{dt} - P \frac{dV}{dt} + \sum_i \dot{m}_i h_i = \frac{dU}{dt} \quad (25)$$

Alguns fatores na operação real de motores diesel tornam a análise da taxa de liberação de calor mais complexa. Um exemplo é a injeção direta (não pré-misturada) de diesel no interior do cilindro, o que resulta em uma distribuição não uniforme de ar-combustível. A esta dificuldade se une a imprevisibilidade da composição dos gases queimados, limitações nos modelos de transferência de calor e efeitos de fendas no cilindro (e.g. entre pistão e anéis), que acumulam certa parcela de gás resfriado e interferem no desenvolvimento da combustão (HEYWOOD, 2018a).

Assumindo uma simplificação da Equação (25) na qual o fluxo entálpico através de folgas no pistão pode ser desconsiderado, chega-se à Equação (26).

$$\frac{dQ}{dt} - p \frac{dV}{dt} + \dot{m}_f h_f = \frac{dU}{dt} \quad (26)$$

Considerando que a contribuição entálpica do combustível é também desprezível, é possível reescrever a Equação (26) sem este termo, além de dividir o termo de troca de calor  $\frac{dQ}{dt}$  em  $\frac{dQ}{dt_Q}$  (liberação de energia química pelo combustível) e  $\frac{dQ}{dt_{TC}}$  (troca de calor através do sistema). Se a Equação de estado para o gás do cilindro for da lei dos gases ideais, a Equação (26) torna-se a Equação (27).

$$\frac{dQ}{dt} = P \frac{dV}{dt} + m \cdot c_v \cdot \frac{dT}{dt} \quad (27)$$

Ainda por meio da lei dos gases ideais, a temperatura pode ser eliminada da Equação (27) por meio da relação da Equação (28), levando à Equação (29).

$$\frac{dP}{P} + \frac{dV}{V} = \frac{dT}{T} \quad (28)$$

$$\frac{dQ}{dt} = \left(1 + \frac{c_v}{R}\right) \cdot P \cdot \frac{dV}{dt} + \frac{c_v}{R} \cdot V \cdot \frac{dP}{dt} \quad (29)$$

É possível escrever a Equação (29) utilizando o termo  $\zeta$ , que representa a relação de capacidades específicas, chegando à Equação (30), sendo que o  $\zeta$  possui valores aproximados de 1,35 para a etapa de compressão e 1,26-1,30 após a combustão.

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{\zeta}{\zeta - 1} \cdot P \cdot \frac{dV}{dt} + \frac{1}{\zeta - 1} \cdot V \cdot \frac{dP}{dt} \quad (30)$$

De forma similar, a temperatura também é calculada a partir das curvas de pressão, conforme a metodologia apresentada por Heywood (2018a). Com base na característica dos gases queimados e na Equação do gás ideal, a temperatura pode ser estimada por meio da Equação (31), na qual  $\bar{R}$  é a constante universal dos gases (8,31432 J/mol·K),  $\dot{m}_{tot/ciclo}$  é a massa total do ciclo, e  $M_b$  é a massa molecular dos gases queimados, dada pela Equação (32).

$$T_i = \frac{P_i \cdot V_i \cdot M_b}{\dot{m}_{tot/ciclo} \cdot \bar{R}} \quad (31)$$

$$M_b = \frac{m_{RP}}{n_b} \quad (32)$$

Na Equação (32),  $m_{RP}$  é a massa da mistura de gases por mol de oxigênio e  $n_b$  é o número de mols do gás queimado, ambos calculados conforme as Equações de (33) a (35), nas quais  $\phi$  é a razão de equivalência, e as letras **y** e **z** são os coeficientes do hidrogênio e no oxigênio, respectivamente.

$$m_{RP} = 32 + 4 \cdot \phi \cdot \zeta \cdot \left(1 + \frac{8}{4 + y}\right) + 28,16 \cdot 3,773 \cdot \zeta \cdot \left(1 - \frac{4 \cdot z}{8 + 2 \cdot y}\right) \quad (33)$$

$$n_b = \phi \cdot \zeta \cdot \left(1 - \frac{4}{4 + y}\right) + 1 + 3,773 \cdot \zeta \cdot \left(1 - \frac{4 \cdot z}{8 + 2 \cdot y}\right) \quad (34)$$

$$\zeta = \frac{2}{2 - \frac{4 \cdot z}{4 + y} \cdot (1 - \phi)} \quad (35)$$

Além da eficiência do motor, existe também o conceito de eficiência de combustão. Este parâmetro leva em conta a concentração de substâncias combustíveis nos gases de exaustão, como CO, hidrocarbonetos não queimados, material particulado e até mesmo hidrogênio. Em outras palavras, a eficiência de combustão (Equação (36)) indica a quantidade de substâncias que

poderiam ter sido queimadas para geração de calor, mas que saíram do cilindro sem reagir.

$$\eta_c = \left\{ 1 - \frac{Pot}{10^3} \cdot \left[ \frac{(EE_{CO} \cdot PCI_{CO}) + (EE_{HC} \cdot PCI_{mist}) + (EE_{MP} \cdot PCI_C) + (EE_{H_2} \cdot PCI_{H_2})}{m_{diesel} \cdot PCI_{diesel} + m_{comb,sec} \cdot PCI_{comb,sec}} \right] \right\} \cdot 100 \quad (36)$$

#### 4.4 Emissões

Para o cálculo das emissões, o ponto de partida são as emissões em base volumétrica (ppm ou %) obtidas em laboratório. Todavia, apenas estas informações não são suficientes para um entendimento adequado da formação de poluentes no processo de combustão, visto que a concentração de uma determinada substância afeta a de outra. Em outras palavras, diluir os gases de exaustão em ar reduz a concentração volumétrica de poluentes sem de fato removê-los. A fim de padronizar a análise de emissões, opções como fixação da concentração de O<sub>2</sub> no escape ou normalização de poluentes com base na potência produzida pelo motor são comumente utilizadas. Nesta tese, será utilizada a normalização pela potência do motor, seguindo o procedimento descrito pela norma ABNT NBR ISO 8178-1 (ABNT, 2012).

Para o cálculo das emissões mássicas ( $q_{m,gás}$ ) de cada um dos poluentes, a Equação (37) é aplicada:

$$q_{m,gás} = u_{gás} \cdot c_{gás} \cdot \dot{m}_{exh} \cdot k_{w,r} \quad (37)$$

Na Equação (37), o parâmetro  $u_{gás}$  é a razão entre a densidade do componente do gás de exaustão e a densidade do gás de exaustão como um todo, e possui valores tabelados para diversos combustíveis e poluentes (ABNT, 2012). Ainda na Equação (37),  $c_{gás}$  é a concentração do componente no gás de exaustão não-diluído (em ppm).

Para o caso das emissões de NO<sub>x</sub>, um fator de correção de umidade  $k_{hd}$  deve ser aplicado. Este fator é dado pela Equação (38):

$$k_{hd} = \frac{1}{1 - 0.0182 \cdot (H_a - 10.71) + 0.0045 \cdot (T_{amb} - 298)} \quad (38)$$

Desta forma, a vazão mássica de cada componente do gás de exaustão é dada pelas Equações (39) (caso se trate de NO<sub>x</sub>) e (40) (demais gases):

$$q_{m,NOx} = u_{NOx} \cdot c_{NOx} \cdot m_{exh} \cdot k_{w,r} \cdot k_{hd} \quad (39)$$

$$q_{m,poluyente} = u_{poluyente} \cdot c_{poluyente} \cdot m_{exh} \cdot k_{w,r} \quad (40)$$

É importante ressaltar que, nas Equações (39) e (40), o fator  $u$  deve ser ajustado para o caso da operação *dual fuel*. Alternativamente aos valores tabelados fornecidos na NBR ISO 8178-1 (ABNT, 2012), este fator também pode ser calculado diretamente por meio da Equação (41):

$$u_{gás} = \frac{\rho_{gás}}{\rho_{exh} \cdot 1000} \quad (41)$$

Por fim, para normalizar a emissão específica  $EE_{gás}$  de cada poluyente com base na potência produzida pelo motor, conforme a Equação (42):

$$EE_{gás} = \frac{q_{m,gás}}{Pot} \quad (42)$$

Uma vez que este procedimento teórico é aplicado aos valores já conhecidos de concentração volumétrica para cada caso estudado, as emissões específicas podem ser avaliadas individualmente, conforme será discutido em itens posteriores.



## **5 SIMULAÇÃO DA COMBUSTÃO EM MOTORES DIESEL**

Embora o uso de ferramentas CFD possa representar uma importante ferramenta na análise e previsão de performance de motores de combustão interna, evitando a necessidade de uma quantidade muitas vezes impraticável de testes experimentais, ela precisa contornar as dificuldades de simular um fenômeno extremamente complexo (MENAA et al., 2019). Estes motores representam um dos sistemas termodinâmicos de mais difícil compreensão, uma vez que envolvem um escoamento compressível com grandes variações de densidade, com números de Mach relativamente altos, turbulento, transiente, cíclico e não estacionário em termos de tempo e espaço (BELAL; MARZOUK; OSMAN, 2013). Neste sentido, a análise teórica de motores de combustão interna pode ser feita em diferentes níveis de complexidade, e cada uma de suas etapas possui particularidades que, assim como alguns exemplos práticos, serão brevemente abordadas nesse capítulo. Uma vez que o foco dessa tese é a etapa de combustão, os modelos voltados exclusivamente para o estudo dos fluxos de admissão e exaustão no cilindro não serão abordados.

### **5.1 Fundamentos de simulação zero-dimensional**

A simulação computacional para motores a combustão interna, assim como em diversas áreas da engenharia, oferece uma oportunidade rápida e potencialmente menos custosa para realizar análises, predições e otimizações de variáveis que afetam o sistema. Estas informações valiosas podem ser utilizadas para direcionar o projeto dos novos motores, a comparação de combustíveis e o desenvolvimento de novas técnicas de combustão, visando principalmente o aumento da eficiência, a redução de emissões e o aumento da vida útil do equipamento (HEYWOOD, 2018a). Por mais simples que seja, a simulação deve envolver ao menos as propriedades termodinâmicas do combustível e do oxidante, o movimento cinético do pistão, os mecanismos de combustão, equações de transferência de calor, perfil de vazões mássicas e eventual fricção ou atrito mecânico (CATON, 2018).

As simulações mais simples para motores de combustão interna são as chamadas zero-dimensionais (ou análise 0D), que também possuem variações em sua complexidade e podem incluir ou não submodelos como recirculação de gases de exaustão (EGR), ar enriquecido com combustíveis e modelos para detonação. A combustão na análise 0D pode ser dividida em uma zona (a mais simples), duas zonas (região queimada e não-queimada) e três zonas (região adiabática, zona não-queimada e camada limite). Embora o tipo de análise 0D escolhido altere a formulação do problema e as equações a serem selecionadas, todos se baseiam nos mesmos princípios termodinâmicos (CATON, 2016). A Figura 14 apresenta a divisão de regiões nos modelos 0D de uma, duas e três zonas.

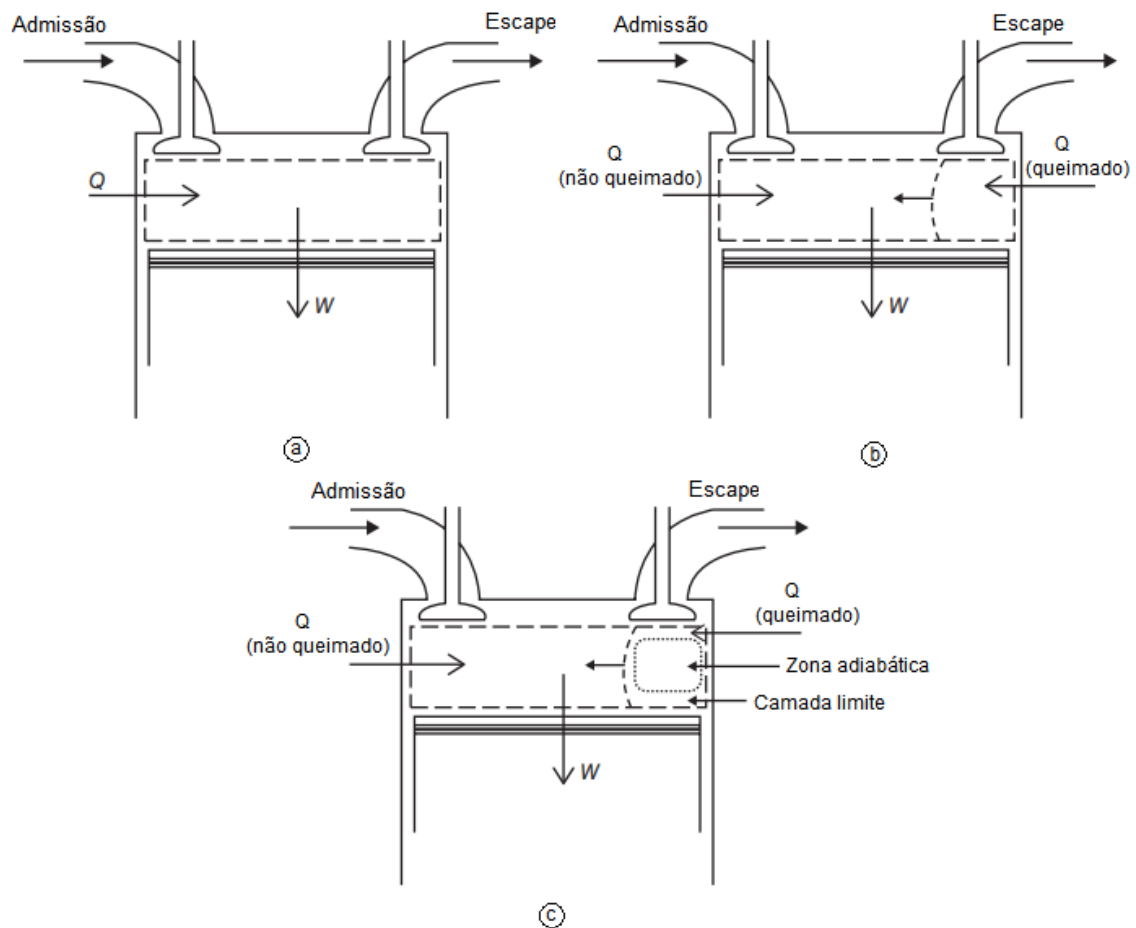


Figura 14: modelos 0D para simulação em motores com (a) uma zona, (b) duas zonas e (c) três zonas. Adaptado de (CATON, 2016).

Para cada região de volume considerada no modelo, equações de continuidade são resolvidas a cada intervalo de tempo ou incremento de ângulo do virabrequim, sendo as principais a conservação da massa e da energia. Estas equações de continuidade podem ser compreendidas pela observação do sistema termodinâmico aberto genérico da Figura 15, que apresenta duas entradas, uma saída, e produz trabalho mecânico enquanto recebe calor.

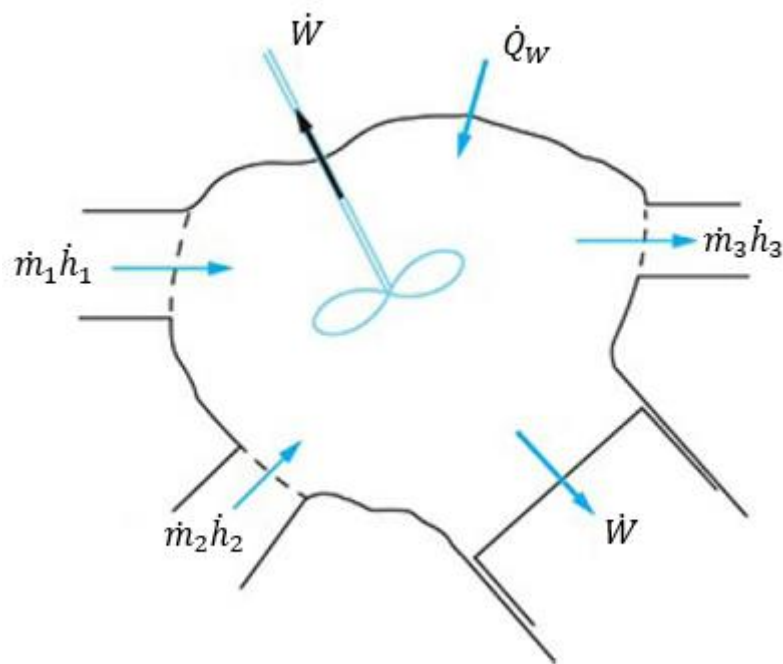


Figura 15: sistema termodinâmico aberto genérico (HEYWOOD, 2018a).

A conservação da massa é simplesmente dada pela Equação (43), na qual  $\dot{m}$  é a taxa de variação de massa no sistema e  $\dot{m}_j$  são os fluxos mássicos entrando (positivo) e saindo (negativo) do sistema:

$$\dot{m} = \sum_j \dot{m}_j \quad (43)$$

Da mesma forma, a conservação da energia é dada pela Equação (44), onde  $\dot{E}$  representa a taxa de variação de energia no sistema,  $\dot{Q}_W$  é a transferência de calor total para o sistema,  $\dot{W}$  é o trabalho produzido e os

produtos  $\dot{m}_j h_j$  são as parcelas de energia que entram e saem do sistema juntas aos fluxos mássicos:

$$\dot{E} = \dot{Q}_W - \dot{W} + \sum_j \dot{m}_j h_j \quad (44)$$

Para que as equações de continuidade sejam solucionadas, são necessárias diversas informações referentes ao funcionamento do motor e às características dos combustíveis, conforme detalhado por Caton (2016):

- Propriedades termodinâmicas: valores instantâneos de energia interna, entalpia, entropia, constante do gás, massa molar, entropia e exergia. A composição da mistura pode ser constante (para baixas temperaturas) ou calculada instantaneamente com base no equilíbrio químico (para altas temperaturas). Uma vez conhecida a composição em determinado instante, as propriedades termodinâmicas são calculadas individualmente para cada substância por meio de ajustes polinomiais e, por fim, é possível estimar as propriedades para a mistura total.
- Geometria do motor: embora a análise 0D não seja tão detalhada quanto a análise CFD (que será discutida adiante), a geometria do motor ainda é uma informação extremamente relevante. Dados como curso, diâmetro, razão de compressão e comprimento da manivela e da biela são utilizados para calcular o volume deslocado, o volume morto e a equação do movimento do pistão a cada velocidade de rotação.
- Propriedades térmicas do cilindro: temperatura inicial, temperatura das paredes e mecanismo de transferência de calor afetam o comportamento térmico do motor e, conseqüentemente, a velocidade das reações de combustão.
- Vazões mássicas: a quantidade de ar e combustível está diretamente associada à potência produzida pelo motor. Também é importante conhecer o período de cada vazão, como abertura e fechamento de válvulas (para o ar) e do injetor (para o combustível).
- Atrito: caso seja necessário avaliar a potência de eixo do motor, as perdas por atrito devem ser consideradas. Para tal, algoritmos já existentes podem ser utilizados para estimar as perdas em cada um dos principais pontos de atrito no motor, como fricção no virabrequim, árvore de cames

e cilindro, perdas na admissão e no escape, bem como nos sistemas de bombeamento de água, óleo e combustível.

Além de todos estes parâmetros de entrada, uma das informações mais importantes para a aplicação de modelos numéricos em motores de combustão interna é o mecanismo de cinética química, que indica o comportamento de cada uma das principais reações químicas sob diferentes estados termodinâmicos. Devido à importância deste tópico e à sua particular relevância a esta tese, a escolha de mecanismos de reação será discutida adiante em um item próprio. Além disso, os modelos utilizados em uma análise 0D variam caso a caso, e o procedimento específico utilizado pelo Chemkin® (*software* utilizado na presente tese) será usado como referência.

Assim como os métodos de análise zero-dimensional já discutidos acima, o Chemkin® utiliza um processo iterativo para resolver equações cinéticas e de continuidade a cada incremento de tempo ou de ângulo do virabrequim. Primeiro, o *software* utiliza o equacionamento proposto por Heywood (2018a), já apresentado na seção 2.3, para aplicar relações geométricas e prever o comportamento cinético do motor para determinado tempo e velocidade de rotação. Esta primeira etapa fornece ao *software* as equações de volume e suas derivadas no tempo, informação essencial para resolução das equações de continuidade já discutidas. Todo o procedimento detalhado neste item é apresentado pelo manual teórico do Chemkin-Pro (ANSYS, 2020c), então recomenda-se a leitura desta fonte para a compreensão mais profunda do passo-a-passo adotado pelo *software*.

Além das equações básicas de movimento do pistão e tamanho da câmara de combustão, o Chemkin® também fornece modelos de transferência de calor que estimam a transferência de energia térmica dos gases para a parede durante as etapas de compressão e expansão. A perda de calor é calculada pela Equação (45):

$$\dot{Q}_{parede} = h_{HT} \cdot A_{parede} \cdot (T - T_{parede}) \quad (45)$$

Na Equação (45), a temperatura da parede ( $T_{parede}$ ) é um dado de entrada fornecido pelo usuário,  $A_{parede}$  é a área parede do cilindro e  $h_{HT}$  é o coeficiente de transferência de calor calculado pela Equação (46), na qual  $Nu_H$  é o número

de Nusselt para a transferência de calor,  $Re$  é o número de Reynolds,  $Pr$  é o número de Prandtl e as constantes  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  são especificadas pelo usuário:

$$Nu_H = \alpha \cdot Re^\beta \cdot Pr^\gamma \quad (46)$$

Em seguida, o número de Nusselt, Reynolds e Prandtl também podem ser escritos conforme as equações (47), (48) e (49), respectivamente:

$$Nu_H = \frac{h_{HT} \cdot B}{\lambda_{gas}} \quad (47)$$

$$Re = \frac{B \cdot \bar{S}_P \cdot \rho}{\mu} \quad (48)$$

$$Pr = \frac{C_p \cdot \mu}{\lambda_{gas}} \quad (49)$$

Nas Equações (47) a (49),  $\lambda_{gas}$  é a condutividade do gás,  $\bar{S}_P$  é a velocidade média do pistão (ver Tabela 1),  $\mu$  é a viscosidade do gás,  $\rho$  é sua massa específica e  $B$  é o diâmetro do cilindro. Os cálculos assumem que as propriedades do gás são as mesmas do ar, o que consiste em uma aproximação válida devido à elevada diluição de combustível e subprodutos em condições típicas de operação.

A fim de aprimorar o valor da velocidade do gás (inicialmente assumida como a mesma que a velocidade média do pistão), utilizada no cálculo do número de Reynolds (Equação (48)) e indiretamente na obtenção do coeficiente de transferência de calor  $h_h$  (Equação (46)), o *software* também oferece a opção de estimar este parâmetro por meio da correlação de Woschni, dada pela Equação (50):

$$w = \left[ C_{11} + C_{12} \cdot \frac{v_{swirl}}{\bar{S}_P} \right] \cdot \bar{S}_P + C_2 \cdot \frac{V_d \cdot T_i}{P_i \cdot V_i} \cdot (P - P_M) \quad (50)$$

onde  $v_{swirl}$  é a velocidade do swirl,  $V_d$  é o volume deslocado,  $P_M$  é a pressão motorizada do cilindro,  $P_i$ ,  $V_i$  e  $T_i$  são as condições iniciais de pressão, volume e temperatura, e  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  e  $C_2$  são parâmetros de ajuste. A pressão motorizada representa a pressão no cilindro para o caso de uma compressão isentrópica, conforme apresentado pela Equação (51), de modo que pressão e volume são correlacionados por uma relação de calores específicos  $\tau$ :

$$\frac{P_M}{P_i} = \left(\frac{V_i}{V}\right)^\zeta \quad (51)$$

Por fim, uma vez obtido o valor da velocidade do gás no cilindro por meio da correlação de Woschni, este parâmetro pode substituir  $\bar{S}_p$  na Equação (48) para um cálculo mais preciso do número médio de Reynolds.

Conforme já discutido no item 5.1, a quantidade de regiões (ou zonas) consideradas na simulação está diretamente associada à precisão, à validade e ao tempo computacional do modelo numérico. Embora o Chemkin® não ofereça um modelo próprio para a operação *dual fuel*, o *software* conta com modelos separados para diesel de injeção direta e combustão HCCI. Para o modelo HCCI, o manual do *software* recomenda a utilização de um modelo multi-zonas, argumentando que a adoção de uma mesma temperatura para todo o volume de controle pode omitir zonas de baixa temperatura, subestimar emissões de CO e HC e superestimar picos de pressão. De maneira resumida, os modelos multi-zonas criam regiões imaginárias que se comportam como reatores isolados, cujas pressões são iguais entre si, as massas são constantes e a única interação entre elas é de trabalho de compressão.

Para cada zona criada pelo modelo, o *software* inicia a solução paralela de uma série de equações, que determinam a concentração de espécies, a temperatura, o volume e a pressão (equações (52) a (54)), conforme apresentado a seguir:

$$\rho^i \cdot \frac{dY_k^i}{dt} = \dot{\omega}_k^i \cdot W_k \quad (52)$$

onde  $\rho^i$  é a densidade da região  $i$  e  $Y_k^i$ ,  $\dot{\omega}_k^i$  e  $W_k$  são a fração mássica, a massa molecular e a taxa de produção molar da  $k$ -ésima espécie.

Em alguns casos, a temperatura de cada zona pode ser importada de um modelo CFD mais preciso, do qual uma distribuição de temperatura pode ser obtida, mas na maioria dos casos este parâmetro deriva da resolução da Equação da energia, conforme a Equação (53):

$$\rho^i \cdot c_v^i \cdot \frac{dT^i}{dt} = - \sum_{k=1}^{kgas} \dot{\omega}_k^i \cdot W_k \cdot u_k^i - \frac{P^i}{V^i} \frac{dV^i}{dt} - \frac{h_{HT}^i \cdot (T^i - T_W) \cdot A_w^i}{V^i} \quad (53)$$

na qual P, T e V são a pressão, a temperatura e o volume de cada região,  $c_v^i$  é o calor específico a volume constante da região,  $h_{HT}^i$  é o coeficiente de transferência de calor e  $A_w^i$  é a superfície de contato da zona.

Uma vez já calculadas composição e temperatura para cada zona do modelo, o volume de cada região precisa ser obtido. Com a pressão ainda desconhecida, uma Equação de estado (como a Equação do gás ideal) é utilizada para correlacionar pressão e volume. Para facilitar a solução do problema de volume, o *software* cria uma nova variável G, dada pela Equação (54):

$$G^i = \sum_{j=1}^i P^j \cdot V^j \quad (54)$$

Dessa forma, a nova variável G é utilizada para estimativa do volume da zona 1 seguindo a Equação do gás ideal (Equação (55)):

$$G^1 = P^1 \cdot V^1 = M^1 \cdot R \cdot T^1 \cdot \left( \sum_{k=1}^{kgas} \frac{Y_k^1}{W_k} \right) \quad (55)$$

Rearranjando a Equação com a definição de G, tem-se, por fim, a Equação (56):

$$G^i = G^{i-1} + P^i \cdot V^i = G^{i-1} + M^i \cdot R \cdot T^i \cdot \left( \sum_{k=1}^{kgas} \frac{Y_k^i}{W_k} \right) \quad (56)$$

Por fim, a pressão resta como a última variável a ser calculada para a zona. Conforme já mencionado, o Chemkin assume uma pressão constante ao longo do volume do cilindro, de modo que este parâmetro não precisa ser calculado individualmente. Assim, a variável G e o volume instantâneo para a última região do modelo são usados para obter a pressão no interior do cilindro.

## 5.2 Simulação da injeção direta em motores Diesel

No item anterior, as equações e procedimentos citados pertenciam ao modelo HCCI do Chemkin, visto que a operação *dual fuel* conta, assim como o modo HCCI, com uma mistura ar-combustível que sofre compressão e, eventualmente, combustão. No modo *dual fuel* convencional, todavia, ao contrário da operação HCCI, a ignição (se realizada da forma planejada) ocorre



por meio de uma injeção piloto, na qual um combustível primário é injetado diretamente na câmara de combustão já a alta temperatura e pressão. Desta forma, embora compartilhem a maioria das equações e a lógica de operação, o modelo apropriado no Chemkin não será o HCCI, e sim o modelo diesel de injeção direta. Este item se concentra no equacionamento do spray e nas propriedades do combustível piloto, uma vez que as equações restantes já foram apresentadas na seção anterior. Da mesma forma, exceto onde outras fontes são explicitamente referenciadas, a base para o procedimento de cálculo da injeção direta de combustíveis líquidos em motores diesel é o manual teórico do Chemkin (ANSYS, 2020d).

O primeiro parâmetro a ser definido são as propriedades termodinâmicas e de transporte do combustível piloto (*i.e.* diesel ou HVO), o que inclui massa específica, calor específico, temperatura crítica, calor de vaporização, pressão de vapor, tensão superficial, viscosidade e condutividade térmica. Estas informações são fornecidas juntamente às demais propriedades termodinâmicas, em um arquivo com extensão reconhecível pelo Chemkin®.

A seguir, a injeção e posterior combustão são divididas em etapas que podem ser mais bem compreendidas por meio da Figura 16. Cada um dos principais passos referentes à injeção direta será discutido em detalhes a seguir, e a cada um deles será atribuído um número de 1 a 5 que pode ser observado graficamente na Figura 16.

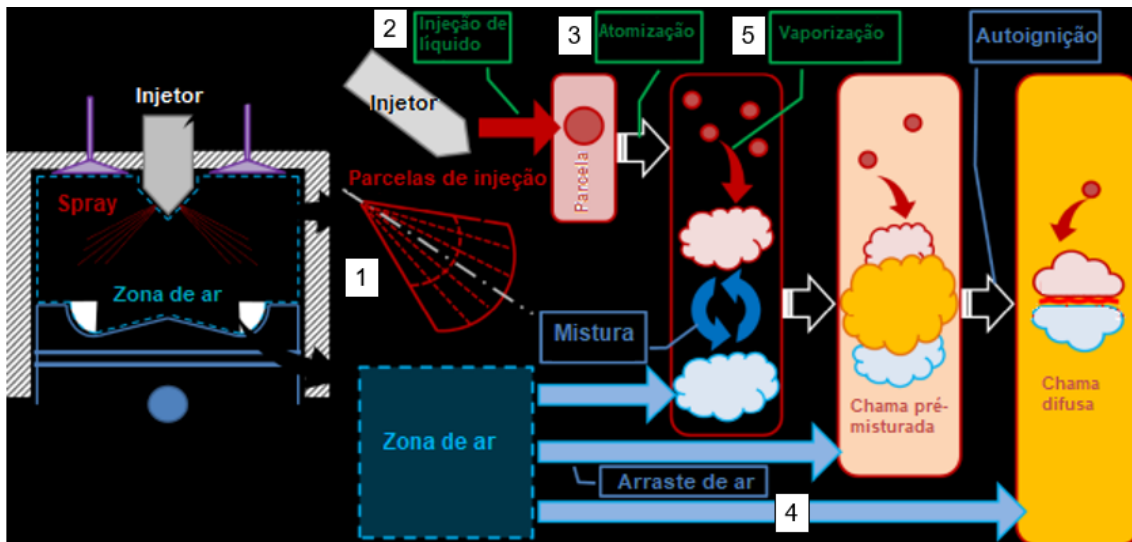


Figura 16: passo a passo da injeção e combustão do combustível em um motor diesel de injeção direta: 1) parcelas de injeção; 2) injeção de combustível; 3) atomização de gotículas; 4) arraste de ar e; 5) vaporização de gotículas.

Adaptado de (ANSYS, 2020d).

Primeiro, o spray é dividido em cones concêntricos com relação à linha de centro do bocal do injetor e em seções na direção de injeção (passo 1). A partir deste ponto, cada uma das parcelas do spray interage com as regiões restantes (ar puro, para operação *single fuel*), mas nunca entre si. A interação das partículas de combustível com o ar é complexa e utiliza alguns sub-modelos, também ilustrados na Figura 16.

Os modelos de injeção de líquido são divididos em fluxo no bocal do injetor, tempo de *break-up* do jato de combustível, tamanho inicial das gotículas e penetração do spray. O fluxo no bocal (passo 2) é detalhado no manual do ANSYS Forte (ANSYS, 2020a), e exige vazão mássica, pressão dos gases, propriedades físicas do líquido e geometria do injetor (diâmetro geométrico do bocal, relação  $L/D_{\text{bocal}}$  e relação  $R/D_{\text{bocal}}$ , conforme Figura 17).

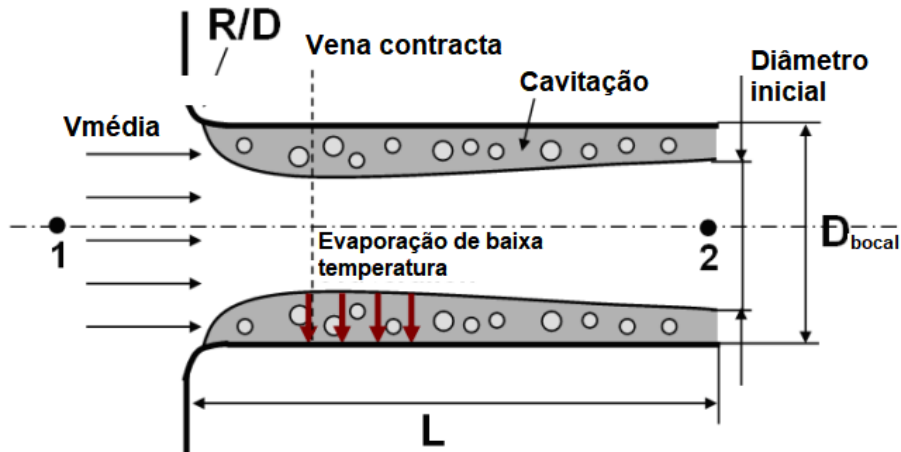


Figura 17: relações geométricas do bocal de um injetor (ANSYS, 2020b).

Com estes dados conhecidos, a velocidade volumétrica média do combustível na entrada do bocal,  $\bar{V}_{média}$ , pode ser calculada pela Equação (57):

$$\bar{V}_{média} = \frac{\dot{m}}{\rho_l \cdot A} = \frac{4 \cdot \dot{m}}{\rho_l \cdot \pi \cdot D_{bocal}^2} \quad (57)$$

Em decorrência de perdas no escoamento, a vazão mássica média através do bocal é sempre menor que o valor estimado pela Equação de Bernoulli, de modo que um coeficiente de descarga é utilizado para representar esta diferença. Esse coeficiente, que no Chemkin é um dado que deve ser fornecido pelo usuário e não calculado pelo *software*, é calculado por meio da Equação (58), na qual  $P_1$  e  $P_2$  são as pressões nos pontos 1 e 2 da Figura 17, respectivamente:

$$C_d = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot (P_1 - P_2) / \rho_1}} \quad (58)$$

Em seguida, o tempo de *break-up* do líquido injetado (passo 3) é calculado por meio da correlação de Hiroyasu et al. (1980). Esta correlação aplica uma função que compensa os efeitos da localização radial de cada parcela de spray sobre sua velocidade de *break-up*, conforme equações (59) e (60):

$$\tau_b = 28.65 \cdot \frac{\rho_{líq} \cdot D_{bocal}}{\sqrt{\rho_{gás} \cdot \Delta P}} \cdot y(m) \quad (59)$$

$$y(m) = \exp \left[ -8.557 \cdot 10^{-3} \cdot \left( \frac{10 \cdot m}{N_r} - 1 \right)^2 \right] \quad (60)$$

na qual  $\rho_{líq}$  e  $\rho_{gás}$  são as massas específicas do líquido e do gás, respectivamente,  $N_r$  é o número de parcelas de spray e  $m$  é o índice radial da parcela.

Em seguida, o diâmetro médio das partículas imediatamente após o *break-up* do líquido na saída do bocal é calculado pela correlação desenvolvida por Hiroyasu, Arai e Tabata (1989) para estimar o Diâmetro Médio de Sauter (SMD)  $d_{32}$ , que por sua vez é utilizado para calcular a dispersão de partículas em cada parcela de spray. Desta forma, o valor do diâmetro médio das partículas é dado pela Equação (61), que seleciona o máximo entre  $\frac{d_{32}^{LS}}{D_{bocal}}$  (Equação (62)) e  $\frac{d_{32}^{HS}}{D_{bocal}}$  (Equação (63)):

$$\frac{d_{32}}{D_{bocal}} = \max \left( \frac{d_{32}^{LS}}{D_{bocal}}, \frac{d_{32}^{HS}}{D_{bocal}} \right) \quad (61)$$

$$\frac{d_{32}^{LS}}{D_{bocal}} = 4.12 \cdot Re_L^{0.12} \cdot We_L^{-0.75} \cdot \left( \frac{\mu_L}{\mu_g} \right)^{0.54} \cdot \left( \frac{\rho_L}{\rho_g} \right)^{0.18} \quad (62)$$

$$\frac{d_{32}^{HS}}{D_{bocal}} = 0.38 \cdot Re_L^{0.25} \cdot We_L^{-0.32} \cdot \left( \frac{\mu_L}{\mu_g} \right)^{0.37} \cdot \left( \frac{\rho_L}{\rho_g} \right)^{-0.47} \quad (63)$$

onde  $Re_L$  e  $We_L$  são os números de Reynolds e de Weber do líquido (diesel),  $\frac{d_{32}}{D_{bocal}}$  é a relação entre o diâmetro de Sauter e o diâmetro do bocal, e as relações  $\left( \frac{\mu_L}{\mu_g} \right)$  e  $\left( \frac{\rho_L}{\rho_g} \right)$  são respectivamente as relações de viscosidade e massa específica entre líquido (diesel) e gás (ar).

Ainda no passo 3, a penetração do spray  $s_p$  é calculada por meio das relações empíricas das equações (64) (antes do *break-up*) e (65) (após o *break-up*):

$$s_p(m, t) = 0.39 \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \Delta P^{inj}}{\rho_{líq}}} \cdot t \cdot y(m), t \leq \tau_b \quad (64)$$

$$s_p(m, t) = 2.95 \cdot \sqrt[4]{\frac{2 \cdot \Delta P^{inj}}{\rho_{líq}^{inj}}} \cdot \sqrt{D_{bocal}/[t + \tau_b(1) - \tau_b(m)]} \cdot y(m), t > \tau_b \quad (65)$$

onde  $\Delta P^{inj}$  é o gradiente de pressão no injetor,  $t$  é o tempo de escoamento e  $y(m)$  é a função de distribuição radial já apresentada na Equação (60).

Para finalizar o passo 3, o último parâmetro necessário é a velocidade das partículas de uma parcela do spray, que é calculada pela derivada temporal da distância de penetração (Equações (66) e (67)):

$$u_p(m, t) = \frac{ds_p(m, t)}{dt} = 0.39 \cdot \sqrt[4]{\frac{2 \cdot \Delta P^{inj}}{\rho_{líq}^{inj}}} \cdot y(m), t \leq \tau_b \quad (66)$$

$$u_p(m, t) = 1.475 \cdot \sqrt[4]{\frac{2 \cdot \Delta P^{inj}}{\rho_{líq}^{inj}}} \cdot \sqrt{\frac{D_{bocal}}{[t + \tau_b(1) - \tau_b(m)]}} \cdot y(m), t > \tau_b \quad (67)$$

O passo 4 envolve o arraste das partículas de combustível já atomizadas. Nessa etapa, considera-se que o momento no início da injeção do líquido é igual ao produto da massa pela velocidade do combustível na saída do bocal. Assumindo que o momento de cada parcela de spray a cada instante é igual ao momento inicial do jato de líquido, tem-se, para uma massa constante de spray, a vazão de ar  $\int \dot{m}_{air}(t)dt$  que sai da zona de ar em direção às parcelas de spray (Equação (68)):

$$\int \dot{m}_{air}(t)dt = \left( \sum_k m_{líq,k}(0) \right) \cdot \left[ \frac{u_p(m, 0)}{u_p(m, t)} - 1 \right] \quad (68)$$

Em seguida, com as partículas de combustível já atomizadas, o último passo (passo 5) consiste nos modelos de vaporização das gotículas. As taxas de vaporização do líquido são calculadas através da taxa de transferência de massas de vapor na fronteira entre cada gotícula e os gases que as cercam. Esta transferência de massa é dada pela Equação (69):

$$\dot{m}_{líq,k} = 2 \cdot \pi \cdot r_{drp} \cdot \bar{\rho}_f \cdot \bar{D}_{k,f} \cdot [Sh_k^* \cdot \ln(1 + B_{M,k})] \quad (69)$$

onde  $r_{drp}$  é o raio da partícula,  $\bar{\rho}_f$  é a massa específica do gás e  $\bar{D}_{k,f}$  é a difusividade mássica das espécies em fase de vapor correspondentes à  $k$ -ésima

componente líquida da superfície externa da gotícula. Além disto,  $Sh_k^*$  e  $B_{M,k}$  são o número de Sherwood e o número de Spalding.

O número de Spalding é calculado pela Equação (70):

$$B_{M,k} = \frac{y_{s,k} - y_{\infty,k}}{1 - y_{s,k}} \quad (70)$$

onde  $y_{s,k}$  e  $y_{\infty,k}$  são a fração de vapor na superfície do combustível e do ar, respectivamente (DEPRÉDURAND; CASTANET; LEMOINE, 2010).

O número de Sherwood, por sua vez, é dado pela Equação (71):

$$Sh_k^* = 2 + (Sh_{k,0} - 2)/F_{M,k} \quad (71)$$

onde  $F_{M,k}$  é dado pela Equação (72) e  $Sh_{k,0}$  é calculado de formas diferentes a depender do número de Reynolds médio (equações (73) e (74)):

$$F_{M,k} = (1 + B_{M,k})^{0.7 \frac{\ln(1+B_{M,k})}{B_{M,k}}} \quad (72)$$

$$Sh_{k,0} = 1 + (1 + Re_{\infty} \cdot Sc_{k,f})^{1/3} \cdot f(\overline{Re}), \overline{Re} < 100 \quad (73)$$

$$Sh_{k,0} = 2 + 0.552 \cdot Re_{\infty}^{1/2} \cdot Sc_{k,f}^{1/3}, Re \geq 100 \quad (74)$$

onde  $f(\overline{Re}) = 1$  para  $\overline{Re} \leq 1$ ,  $f(\overline{Re}) = \overline{Re}^{0.077}$  para  $\overline{Re} < 100$  e  $Sc_{k,f}$  é o número de Schmidt (WEINER et al., 2019), dado pela relação entre transporte de momento e de massa conforme Equação (75), na qual  $\vartheta$  é a viscosidade cinemática e  $\overline{D}$  é a difusividade (RAPP, 2017):

$$Sc_{k,f} = \frac{\vartheta}{\overline{D}} \quad (75)$$

Por fim, a temperatura da gotícula, parâmetro essencial para o cálculo da taxa de vaporização, é calculada por meio de um balanço de energia, podendo a temperatura ser assumida como constante ou variável entre núcleo e superfície da partícula (ANSYS, 2020d). O calor proveniente dos gases quentes é transferido para as gotículas, tanto para vaporizar suas superfícies (calor latente) como para elevar a temperatura de seus núcleos (calor sensível).

O fluxo de calor recebido pela superfície das gotículas é dado pela Equação (76):

$$\dot{Q}_0 = \frac{(\sum_k \dot{m}_{L,k}) \cdot \bar{C}_{p,f} \cdot (T_\infty - T_{sup})}{B_T} \quad (76)$$

onde  $\bar{C}_{p,f}$  é o calor específico do combustível,  $T_\infty$  é a temperatura da vizinhança,  $T_{sup}$  é a temperatura da superfície da gotícula e  $B_T$  é o número de Spalding para transferência de calor, dado pela Equação (77):

$$1 + B_T = \left(1 + \sum_k B_{M,k}\right)^\varphi \quad (77)$$

Na Equação (77), o parâmetro  $\varphi$  é calculado por meio das Equações (78) a (81):

$$\varphi = \left(\frac{\bar{C}_{p,f}}{\bar{C}_{p,\infty}}\right) \cdot \left(\frac{Sh^*}{Nu^*}\right) \cdot \left(\frac{1}{Le_\infty}\right) \quad (78)$$

$$Nu^* = 2 + \frac{(Nu_0 - 2)}{F_T} \quad (79)$$

$$Nu_0 = 1 + (1 + Re_\infty \cdot Pr_f)^{1/3} \cdot f(Re_\infty), Re < 100 \quad (80)$$

$$Nu_0 = 2 + 0.552 \cdot Re_\infty^{1/2} \cdot Pr_f^{1/3}, Re \geq 100 \quad (81)$$

Na Equação (78),  $Le_\infty$  é o número de Lewis da mistura gasosa que circunda a gotícula, dado pela Equação (82), onde  $k_L$  é a condutividade térmica do fluido:

$$Le_\infty = \frac{\bar{D}}{k_L} \quad (82)$$

É importante observar que o parâmetro  $\varphi$  depende de  $B_T$ , de modo que um processo iterativo deve ser realizado para solução das equações que levam à estimativa do fluxo de calor recebido pela superfície das gotículas.

Por outro lado, o fluxo de calor direcionado ao núcleo das gotículas é dado pela Equação (83):

$$Q_{núcleo} = 4 \cdot \pi \cdot r_{drp}^2 \cdot \frac{k_L}{\delta_e} \cdot (T_{sup} - T_{drp}) \quad (83)$$

onde  $r_{drp}$  é o raio da gotícula e  $\delta_e$  é dado pela Equação (84):

$$\delta_e = \sqrt{\pi \cdot \chi \cdot \alpha_L \cdot (t' - \tau_b)} \quad (84)$$

Na Equação (84),  $\chi$  é dado pela Equação (85):

$$\chi = 1.86 + 0.86 \cdot \tanh \left[ 2.225 \cdot \log_{10} \left( \frac{Pe_L}{30} \right) \right] \quad (85)$$

onde  $Pe_L$  é o número de Peclet da gotícula de líquido, dado pela Equação (86):

$$Pe_L = Re_L \cdot Pr_L \quad (86)$$

Com os fluxos de calor dos gases para as gotículas conhecidos, o balanço de energia em cada uma delas é dado pela Equação (87):

$$\begin{aligned} \left( \sum_k \dot{m}_{L,k} \right) \cdot \bar{c}_{p,L}(T_d) \frac{dT_d}{dt} \\ = \left( \sum_k \dot{m}_{vap,k} \right) \cdot (\bar{c}_{p,L}(T_d) \cdot T_d - \bar{c}_{p,L}(T_s) \cdot T_s) + \dot{Q}_{núcleo} \end{aligned} \quad (87)$$

onde, para o caso do Chemkin, é adotado um perfil isotérmico entre o núcleo e a superfície das gotículas de modo que  $\dot{Q}_{núcleo} = 0$ .

O último parâmetro para compreender o fenômeno da vaporização do combustível é identificar o diâmetro das partículas. Primeiro, o número de gotículas após o *break-up* do líquido é considerado constante durante a vaporização, e é dado pela Equação (88):

$$N_{got} = \frac{\sum_k \dot{m}_{L,k}(0)}{\rho_L(0) \cdot \pi \cdot d_{32}^3 / 6} \quad (88)$$

Finalmente, o diâmetro das gotículas após o *break-up* é dado pela Equação (89):

$$d_{got}(t) = \left[ \frac{6}{\pi \cdot \rho_L(t) \cdot N_{got}} \cdot \sum_k \dot{m}_{L,k}(t) \right]^{1/3} \quad (89)$$

### 5.3 Modelos de cinética química

Um modelo de cinética química relaciona uma série de espécies e reações químicas, com as correspondentes taxas de reação diretas e reversas, a fim de representar adequadamente um processo de combustão (Curran, 2019). Para que um modelo de cinética química seja utilizado, são necessários modelos numéricos que representem a aplicação específica a ser utilizada. No caso da análise em motores a combustão interna, alguns dos *softwares* mais comuns são



CHEMKIN® (ZEHN; SARAY, 2018), ANSYS Fluent® (DIXIT et al., 2020) e GT-POWER® (YANG; LIAO; LIU, 2012).

Modelos de cinética química são extremamente complexos e muitas vezes envolvem um número muito grande de reações. A título de exemplo, o modelo detalhado da Universidade de San Diego para a combustão de hidrogênio e hidrocarbonetos C0:C4 envolve 57 espécies e 268 reações (UCSD, 2016), mas modelos para combustíveis mais complexos podem passar de 10.000 reações químicas. Os primeiros modelos cinéticos foram desenvolvidos na década de 1950 e abordavam reações de decomposição de ozônio e hidrazina (CURRAN, 2019). Devido à alta capacidade computacional exigida pelo alto número de equações a serem solucionadas, a complexidade dos modelos vem evoluindo com o tempo em decorrência do avanço na capacidade computacional, como pode ser observado na Figura 18 (EGOLFOPOULOS et al., 2014).

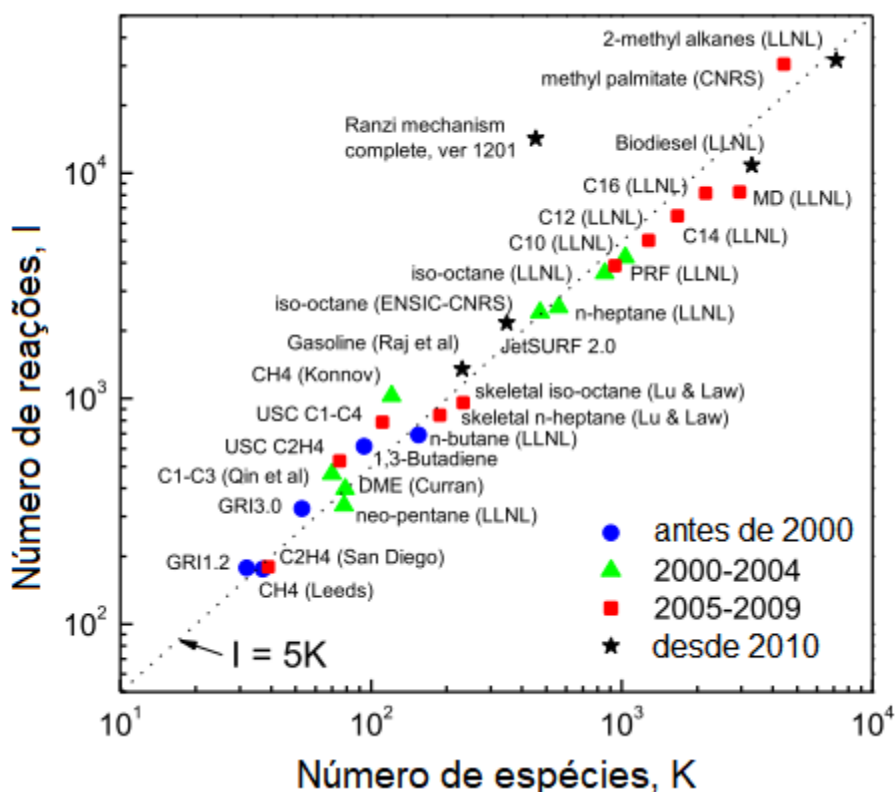


Figura 18: evolução da complexidade dos modelos cinéticos para combustão (EGOLFOPOULOS et al., 2014).

O aparecimento de produtos intermediários num modelo de cinética química apresenta um comportamento hierárquico, com mecanismos para hidrocarbonetos longos englobando também as reações já conhecidas para hidrogênio, oxigênio e hidrocarbonetos subjacentes. Todavia, devido à recombinação de compostos, pode ocorrer a formação de hidrocarbonetos maiores que o combustível original, o que aumenta ainda mais o número de reações a serem incluídas (CURRAN, 2019). Um exemplo é a combustão de metano, que pode apresentar uma recombinação dos radicais metil e formar etano, além de etileno e acetileno (WARNATZ, 1981). Um fluxograma simplificado para a decomposição de metano é apresentado pela Figura 19.

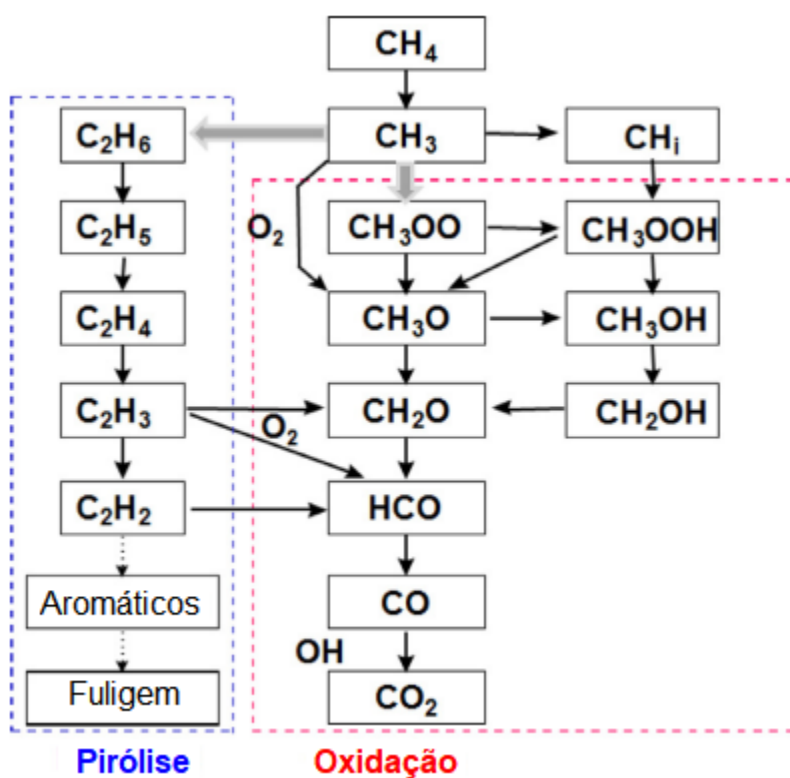


Figura 19: fluxograma da decomposição e recombinação de metano (CURRAN, 2019).

No CHEMKIN®, os mecanismos químicos são acompanhados da lista de espécies, substâncias e suas respectivas reações químicas. São também apresentados os valores de  $A_a$ ,  $b_a$  e  $E_a$ , que representam o fator pré-exponencial, o fator de temperatura e a energia de ativação na equação de Arrhenius modificada (90) (WANG; QIN; LI, 2022), respectivamente.

$$k = A_a \cdot T^{b_a} \cdot e^{\left(\frac{-E_a}{R \cdot T}\right)} \quad (90)$$

Dentre as opções de entrada para os dados referentes à combustão e às propriedades de cada combustível, o ANSYS FORTE® oferece a possibilidade de se utilizar arquivos compatíveis com o *software* de cinética química Chemkin®. Estes arquivos consistem em uma extensão “.*therm*”, que fornece dados termodinâmicos referentes a cada uma das espécies envolvidas nas reações cinéticas, e em uma extensão “.*chem*”, que fornece as reações envolvidas e parâmetros para ajuste da Equação de Arrhenius modificada (Equação (90)). Há, ainda, um arquivo que contém as propriedades de transporte de cada substância, como viscosidade, condutividade térmica e difusividade.

Uma vez que o Chemkin® é, ao mesmo tempo, a fonte original dos dados termoquímicos da combustão e um *software* de análise 0D, com menos tempo computacional, é também uma boa opção para validação inicial dos resultados numéricos. O Chemkin® oferece um modelo específico para análise em motores de combustão interna, incluindo motores de ignição por compressão. Desta forma, a validação inicial foi realizada utilizando este *software*, com foco principal no ajuste da curva de pressão no cilindro, a partir da qual é possível extrair diversas informações referentes ao processo de combustão (DA COSTA et al., 2021). Com dados referentes à geometria do motor e sua operação, é possível gerar resultados de uma análise 0D a serem validados pelos dados de laboratório. A validação de resultados será apresentada adiante, na seção de resultados. Na Figura 20 apresenta-se um exemplo de resultado para a curva de pressão e emissões de CO<sub>2</sub> em um motor diesel utilizando um modelo cinético simplificado para diesel fóssil.

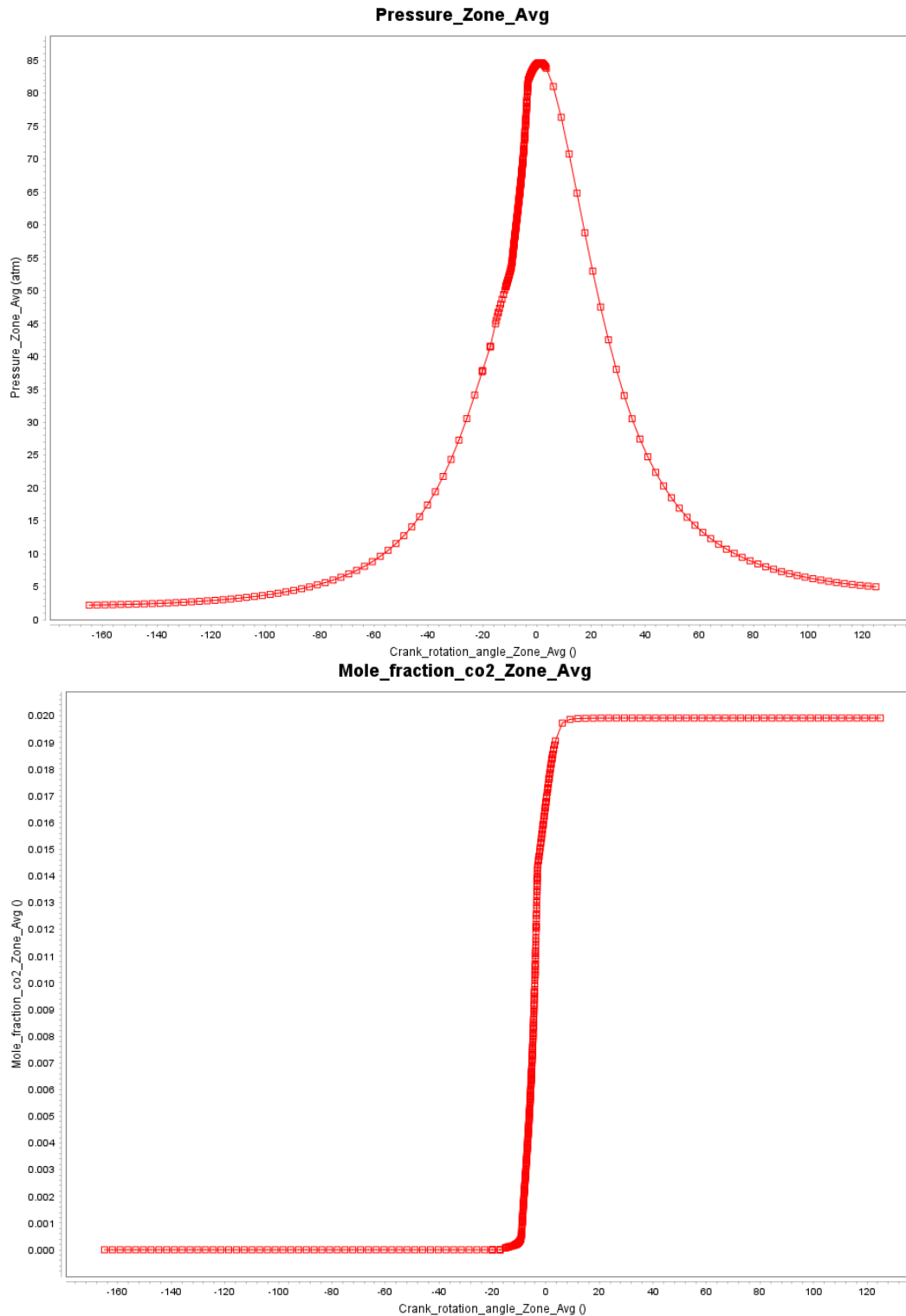


Figura 20: Exemplo de resultado do Chemkin® com (a) curva de pressão no cilindro e (b) emissões de CO<sub>2</sub> em ppm por ângulo do virabrequim.

O Chemkin® requer uma série de parâmetros para efetuar a análise 0D, tais como geometria do motor, dados de injeção, abertura e fechamento de válvulas (vide Tabela 5), bem como pressão e temperatura iniciais (medida e

estimada em laboratório, respectivamente). Para os parâmetros que não puderam ser medidos e/ou estimados, devem ser adotados valores coerentes com a literatura e que resultaram em um ajuste satisfatório nas respostas, como será discutido adiante.

Uma vez que o modelo diesel for adequadamente validado, deve-se seguir para a verificação dos modelos também em operação *dual fuel*. Para o caso da operação *dual fuel*, em que ocorre a queima de dois combustíveis simultaneamente, o modelo cinético precisa incluir todas as substâncias, enquanto o modelo termodinâmico precisa conter as propriedades de todas as espécies envolvidas após a adição do segundo combustível.

A escolha de modelos cinéticos apropriados para a simulação *dual fuel* para diesel e HVO deve considerar a confiabilidade de reações envolvendo tanto o combustível primário como o secundário (syngas, biogás e biometano). A simulação de modos convencionais de operação envolvendo diesel puro já é bastante conhecida, e existe uma abundância de modelos cinéticos disponíveis. Os mecanismos mais completos, que incluem hidrocarbonetos de cadeia mais longa e que buscam representar com fidelidade a composição real do diesel, podem apresentar cerca de 30,000 reações e mais de 600 espécies, como é o caso dos modelos apresentados pelo grupo CRECK, da Politécnica de Milão (FRASSOLDATI ET AL., 2015). Ao mesmo tempo, outros modelos representam o diesel por meio de combustíveis substitutos de cadeia mais curta, como o n-heptano (MAROTEAUX, 2017) e o n-dodecano (FANG et al., 2020), de forma a reduzir a quantidade de reações envolvidas e diminuir o tempo computacional exigido para as simulações. Alguns modelos podem ser reduzidos a menos de 10 reações, sendo limitados a condições operacionais mais restritas, mas aumentando a velocidade da análise numérica (MAROTEAUX; VAGLIECO; MANCARUSO, 2018).

Um modelo que já foi validado para operação *dual fuel* com diesel e que contém sub-mecanismos para os combustíveis secundários utilizados neste trabalho é o modelo de Ren et al. (2017). Este mecanismo possui 179 espécies e 758 reações, e já foi utilizado em estudos envolvendo a operação conjunta de diesel e biogás reformado em motores (Mahmoodi et al., 2021). O modelo utiliza uma mistura de 90% n-hexadecano e 10% de tolueno para representar o diesel,

já que esta combinação apresentou boa predição do atraso de ignição em diversas condições (REN et al., 2017). Devido à abrangência do mecanismo de Ren et al. (2017), ele será utilizado para a representação da operação *dual fuel* com diesel no presente trabalho.

Já para a operação com HVO, há a necessidade da adaptação de escolha ou adaptação de modelos cinéticos já existentes, uma vez que, até o momento, não existe um modelo desenvolvido exclusivamente para a operação com este combustível. Embora este problema pudesse ser contornado pela adaptação de modelos cinéticos que pudessem representar a operação de HVO para determinada faixa de operação, seguindo a mesma metodologia de simplificação de modelos cinéticos para diesel e outros combustíveis (MAROTEAUX, 2017), o presente trabalho realizou uma comparação entre possíveis composições que representem o HVO, utilizando modelos cinéticos já existentes e validados.

Neste sentido, foram consideradas duas composições possíveis para o HVO, também utilizando o modelo de Ren et al. (2017): o dodecano ( $C_{12}H_{26}$ ), utilizado previamente por pesquisadores da Universidade de Valência para modelagem do HVO (GARCIA-OLIVER et al., 2023); e o hexadecano ( $C_{16}H_{34}$ ), cujo número de carbonos é mais representativo da composição real e que se resume a uma versão puramente parafínica do diesel recomendado pelos autores do mecanismo cinético utilizado. Embora uma simulação 0D realizada no Chemkin® tenha indicado que ambas as escolhas levam a um atraso de ignição bastante próximo dos dados experimentais fornecidos por Valco et al. (2017), conforme ilustra a Figura 21, o hexadecano foi escolhido como substituto do HVO devido aos fatores supracitados. Para uma comparação mais aprofundada, recomenda-se a comparação com outros parâmetros experimentais, tais como a velocidade de chama.

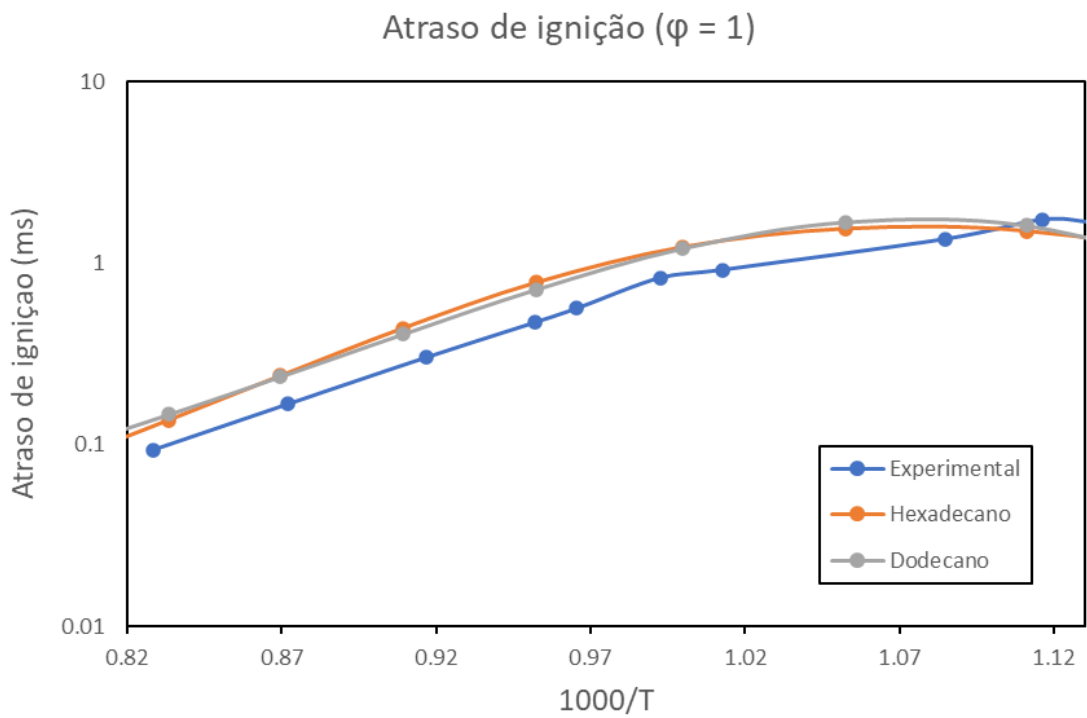
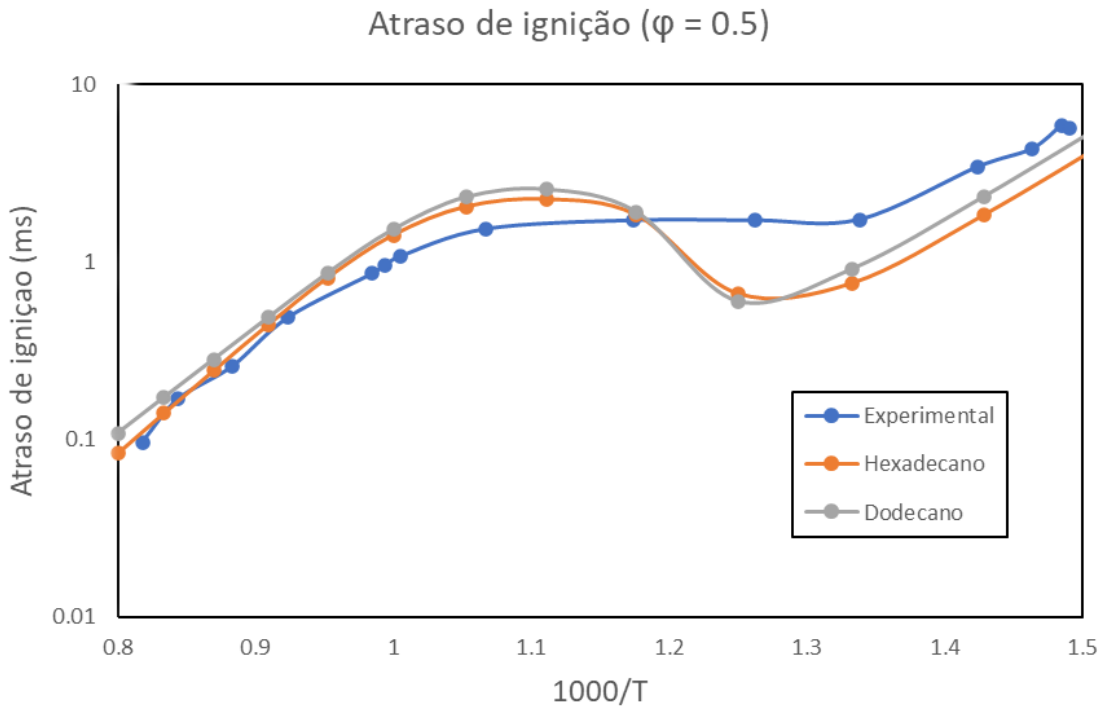


Figura 21: validação dos atrasos de ignição do dodecano e do hexadecano em diversas condições.

#### 5.4 Fundamentos da análise CFD em motores de combustão interna

Como já mencionado anteriormente, a análise 0-D é uma opção simplificada da análise CFD. Desta forma, muitas das equações já apresentadas se repetem na análise tridimensional e são aplicadas aos fluidos de trabalho (ar,

combustível e seus produtos). Como complemento, a fluidodinâmica básica é regida pelas equações de Navier-Stokes, e modelos de conservação de massa, momento e energia similares aos previamente apresentados são aplicados ao volume de controle. Além disso, modelos em CFD podem variar conforme a Equação de estado empregada para os gases, o modelo de difusão (o ANSYS Forte utiliza a Lei de Fick) e a forma de solução para difusividade térmica. A modelagem do spray segue o mesmo padrão utilizado pelo Chemkin®, já apresentado no item anterior. Todas as equações e modelos mencionados podem ser consultados em detalhes no manual teórico do ANSYS Forte (ANSYS, 2020b).

Apesar de compartilhar boa parte da base teórica da análise zero-dimensional, uma análise em CFD leva em conta também os detalhes da geometria e permite uma compreensão mais profunda dos campos de escoamento formados no interior do cilindro e seus efeitos nos contornos de temperatura e na formação de produtos de combustão. Esta análise tridimensional aplica equações de conservação para resolver temporalmente modelos como campos de velocidade, temperaturas e concentração de espécies. As equações empregadas pelo *solver* do *software* CFD são:

- Conservação da massa: representada pela Equação (91), está associada à variação de massa específica dentro da geometria ao longo do tempo, na qual  $\rho$  é a massa específica do fluido,  $t$  é o tempo,  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade do escoamento, e  $\dot{\rho}^S$  é a taxa de incremento da massa específica causada pela vaporização do spray.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{u}) = \dot{\rho}^S \quad (91)$$

- Conservação de espécies: dada pela Equação (92), se assemelha à conservação da massa, porém é aplicada a cada um dos componentes que formam a mistura, na qual  $\rho_i$  é a massa específica de cada espécie  $i$ ,  $N_{esp}$  é o número de espécies,  $y_i$  é a fração mássica de cada espécie  $i$ ,  $D_{dif}$  é o coeficiente de difusão,  $\phi$  é o termo de fluxo turbulento e  $\dot{\rho}_i^C$  é a taxa de formação de espécies.

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_i \mathbf{u}) = \vec{\nabla} \cdot [\rho D_{dif} (\nabla y_i)] + \vec{\nabla} \cdot \phi + \dot{\rho}_i^C + \dot{\rho}_i^S \quad \text{onde } i = 1, 2, \dots, N_{esp} \quad (92)$$



- Conservação de momento linear: dada pela Equação (93), considera os movimentos do fluido, forças de superfície, forças de campo e turbulência, na qual  $P$  é a pressão,  $F^S$  é a taxa específica de ganho de momento,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $\Gamma$  é o tensor das tensões da convecção não linear, e  $\sigma$  é o tensor de tensões viscosas, dado pela Equação (94).

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\vec{\nabla} P + \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \vec{\nabla} \cdot \boldsymbol{\Gamma} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}^S \quad (93)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \rho \nu \left[ \vec{\nabla} \mathbf{u} + (\vec{\nabla} \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\vec{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (94)$$

- Conservação da energia: dada pela Equação (95), que relaciona a variação de energia interna com as entradas e saídas de calor e trabalho a partir da primeira lei da termodinâmica, na qual  $\frac{\partial \rho U}{\partial t}$  representa a variação temporal de energia interna,  $\varepsilon$  é a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta,  $\mathbf{H}$  representa o termo convectivo,  $\dot{Q}^C$  e  $\dot{Q}^S$  representam respectivamente a liberação de calor por reações químicas e por interações do spray,  $\dot{Q}_{rad}$  é a perda de calor por radiação, e  $\mathbf{J}$  é o fluxo de calor que inclui condução de calor e difusão entálpica.

$$\boldsymbol{\sigma} \frac{\partial \rho U}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{u} U) = -p \vec{\nabla} \cdot \mathbf{u} - \vec{\nabla} \cdot \mathbf{J} - \vec{\nabla} \cdot \mathbf{H} + \rho \varepsilon + \dot{Q}^C + \dot{Q}^S - \dot{Q}_{rad} \quad (95)$$

- Equação de estado: dada pela Equação (96), também conhecida como Equação do gás ideal, define as propriedades termodinâmicas da mistura para cada condição operacional, na qual  $R$  é a constante universal dos gases e  $W_i$  é a massa molecular da espécie  $i$ .

$$p = R \cdot T \sum_i \left( \frac{\rho_i}{W_i} \right) \quad (96)$$

De igual importância são os modelos de turbulência, dentre os quais se destacam os modelos de simulação numérica direta (DNS, do inglês *Direct Numerical Simulation*), de grandes escalas (LES, do inglês *Large Eddy Simulation*) e de média de Reynolds (RANS, do inglês *Reynolds Averaged Navier-Stokes*) (ALI et al., 2022). A modelagem RANS, na sua variante  $k$ - $\varepsilon$ , foi escolhida para a simulação do motor, conforme estudos anteriores (BARATTA et al., 2020; HAN; REITZ, 1995), de modo que este será o modelo detalhado no presente trabalho.

O primeiro modelo RANS k-ε foi inicialmente proposto por Harlow e Nakayama (HARLOW; NAKAYAMA, 1968), após esforços para resolução de problemas turbulentos. Este modelo fornece a resolução do tensor  $\Gamma$ , apresentado na Equação (93), conforme a Equação (97), na qual  $\nu_T$  é a viscosidade cinemática turbulenta (Equação (98)), que se relaciona com a energia cinética turbulenta  $\bar{k}$  apresentada pela Equação (99).

$$\Gamma = -\rho\nu_T \left[ \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] + \frac{2}{3} \rho k \mathbf{I} \quad (97)$$

$$\nu_T = C_\mu \frac{\bar{k}^2}{\bar{\varepsilon}} \quad (98)$$

$$\bar{k} = -\frac{1}{2\rho} \text{traço}(\Gamma) \quad (99)$$

Na Equação (98), o fator  $C_\mu$  é um dos vários fatores que aparecem na resolução do modelo RANS k-ε, e que variam conforme o modelo específico (Standard k-ε ou RNG k-ε). O termo de fluxo turbulento  $\phi$  que aparece na Equação (92) é dado pela Equação (100), na qual  $\bar{D}_T$  é a difusividade turbulenta.

$$\phi = \rho \cdot D_T \cdot \nabla y_k \quad (100)$$

De forma similar, o termo de fluxo turbulento  $\mathbf{H}$  na Equação (95) é dado pela Equação (101), na qual  $\lambda_T$  é a condutividade térmica turbulenta, relacionada à difusividade térmica turbulenta  $\alpha_T$  e ao calor específico  $C_p$  por meio da Equação (102).

$$\mathbf{H} = -\lambda_T \cdot \nabla T - \rho \cdot D_T \cdot \sum_k \tilde{h}_k \cdot \nabla y_k \quad (101)$$

$$\lambda_T = \rho \cdot C_p \cdot \alpha_T \quad (102)$$

A massa turbulenta e a difusividade térmica são relacionadas à viscosidade turbulenta por meio das Equações (103) e (104), nas quais Sc e Pr são os números de Schmidt e de Prandtl, respectivamente.

$$D_T = \frac{\nu_T}{Sc_T} \quad (103)$$

$$\alpha_T = \frac{\nu_T}{Pr_T} \quad (104)$$

No caso do uso do modelo Standard k-ε, para a modelagem da energia cinética turbulenta  $\bar{k}$ , dada pela Equação (99), e da taxa de dissipação  $\bar{\varepsilon}$ , que

aparece na Equação (98), são utilizadas as Equações (105) e (106), nas quais  $Pr_k$ ,  $Pr_\varepsilon$ ,  $C_{\varepsilon 1}$ ,  $C_{\varepsilon 2}$  e  $C_{\varepsilon 3}$  são constantes de modelo, apresentadas na

Tabela 7. Nas mesmas equações,  $\dot{W}^S$  é um termo fonte baseado na função probabilidade de distribuição de gotas, conforme apresentado por Amsden (1997), e  $C_s$  é considerado como 1.5 de acordo com o mesmo autor.

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} k) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{u} + (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\Gamma}) : \nabla \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[ \frac{(\mu + \mu_T)}{Pr_k} \nabla k \right] - \rho \bar{\varepsilon} + \overline{W^S} \quad (105)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) \\ = -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3}\right) \rho \bar{\varepsilon} \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[ \frac{(\nu + \nu_T)}{Pr_\varepsilon} \nabla \bar{\varepsilon} \right] \\ + \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \left[ C_{\varepsilon 1} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\Gamma}) : \nabla \mathbf{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \bar{\varepsilon} + C_s \overline{W^S} \right] \end{aligned} \quad (106)$$

Já para a modelagem avançada usando o modelo RNG k- $\varepsilon$ , que considera um termo adicional referente à turbulência não-isentrópica, a Equação (106) é substituída pela Equação (107).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \varepsilon) \\ = -\left(\frac{2}{3} C_{\varepsilon 1} - C_{\varepsilon 3}\right) \rho \bar{\varepsilon} \nabla \cdot \mathbf{u} + \nabla \cdot \left[ \frac{(\nu + \nu_T)}{Pr_\varepsilon} \nabla \bar{\varepsilon} \right] \\ + \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \left[ C_{\varepsilon 1} (\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\Gamma}) : \nabla \mathbf{u} - C_{\varepsilon 2} \rho \bar{\varepsilon} + C_s \overline{W^S} \right] - \rho R \end{aligned} \quad (107)$$

Na Equação (107), R é um termo calculado pela Equação (108), na qual  $\eta$  é dado pela Equação (109).

$$R = \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0) \bar{\varepsilon}^2}{1 + \beta \eta^3} \frac{1}{k} \quad (108)$$

$$\eta = (2\bar{\mathbf{S}} : \bar{\mathbf{S}})^{1/2} \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \quad (109)$$

Na Equação (109),  $\bar{\mathbf{S}}$  é o tensor da taxa de deformação média, dado pela Equação (110).

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (110)$$

Tabela 7: constantes nos modelos Standard k-ε ou RNG k-ε (ANSYS, 2020a).

Constante/ Modelo	$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	$\frac{1}{Pr_k}$	$\frac{1}{Pr_\varepsilon}$	$\eta_0$	$\beta$
$k-\varepsilon$ Standard	0,09	1,44	1,92	-1,0	1,0	0,769	---	---
RNG $k-\varepsilon$	0,0845	1,42	1,68	Conforme Han e Reitz (1995)	1,39	1,39	4,38	0,012

A cada iteração, o *solver* do *software* também calcula a concentração momentânea de cada espécie, que se altera em decorrência das reações de cinética química. Nos mecanismos cinéticos, as reações químicas (reversíveis ou não) envolvendo uma quantidade N de espécies químicas pode ser representada pela Equação (111), na qual  $v'$  representa o coeficiente estequiométrico dos reagentes,  $v''$  o coeficiente dos produtos,  $X$  indica a espécie química,  $i$  é índice da reação e  $j$  é o índice da espécie química.

$$\sum_{j=1}^N (v'_{ji} X_j) \Leftrightarrow \sum_{j=1}^N (v''_{ji} X_j), (i = 1, \dots, I) \quad (111)$$

A taxa de produção da k-ésima espécie na i-ésima reação é dada pela Equação (112), na qual  $q_i$  a taxa de progresso da reação  $i$ , dada pela Equação (113).

$$\dot{\omega}_{ki} = (v''_{ji} - v'_{ji}) \cdot q_i, (k = 1, \dots, K) \quad (112)$$

$$q_i = k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v'_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^N [X_j]^{v''_{ji}} \quad (113)$$

Deste modo, a soma dos componentes  $\dot{\omega}_{ki}$  da Equação (114) para todas as reações resulta no termo  $\dot{\rho}_i^C$ , que aparece na Equação (92), e é dado pela Equação (115).

$$\dot{\rho}_i^C = W_i \cdot \sum_{k=1}^K \dot{\omega}_{ki} \quad (115)$$

De forma similar, a contribuição de cada reação para a liberação de calor é dada pela Equação (116), na qual  $Q_i$  é o calor de reação da reação  $i$  no zero absoluto e  $(\Delta h_f^0)_k$  é o calor de formação da espécie  $k$ .

$$\dot{Q}_c = - \sum_{i=1}^I Q_i q_i = \sum_{i=1}^I \sum_{k=1}^K (v''_{ki} - v'_{ki}) \cdot (\Delta h_f^0)_k \cdot q_i \quad (116)$$

Após o desenvolvimento dos modelos de turbulência e cinética química, o ANSYS Forte® aplica um modelo de interação entre ambos, que visa considerar os efeitos da turbulência sobre o desenvolvimento de reações químicas. O equacionamento adicional é baseado nos trabalhos de Kong et al. (KONG; ECKHOFF; ALFERT, 1995; KONG et al., 2001), onde o procedimento de interação de modelos pode ser encontrado em detalhes.

Com o modelo cinético para diesel escolhido no Chemkin, pode-se realizar uma análise mais detalhada em 3D, que leve em conta informações adicionais da geometria e de outros parâmetros relevantes na operação do motor. Neste trabalho, foi utilizado o *software* ANSYS Forte®, incorporado ao pacote do ANSYS® e especializado na análise de motores de combustão interna, com os mesmos parâmetros utilizados na validação 0D do Chemkin.

A simulação CFD descrita no presente estudo visa analisar a combustão *dual fuel* em um motor Buffalo BFDE 10.0 Diesel. O foco na combustão e não em outras etapas modeláveis do motor, como admissão de combustível, se deve ao fato de o Laboratório de Máquinas Térmicas da UNIFEI ser equipado com equipamentos de medição que permitem a obtenção das propriedades em qualquer etapa do ciclo de operação. Assim sendo, pode-se iniciar a simulação não na etapa de admissão de ar, mas diretamente na etapa de compressão, quando as válvulas de admissão e escape estão ambas fechadas. As propriedades como temperatura e pressão referentes à posição em qual a válvula de admissão é fechada (IVC, do inglês *Inlet Valve Closed*) servem de dados de entrada para a simulação, economizando o tempo computacional que seria necessário para estimar os mesmos dados por meio de simulações prévias.

Para que a simulação seja o mais fiel possível à realidade, o motor a ser computacionalmente estudado precisa ser corretamente reproduzido. Para garantir esta fidelidade, é importante incluir parâmetros como a razão de compressão, dimensões gerais da câmara de combustão e de componentes do motor, perfil de funcionamento das válvulas, tempo de injeção, entre outros.

De igual importância para uma simulação adequada é a correta descrição da câmara de combustão. A geometria é fundamental para reproduzir corretamente a mecânica dos fluidos no interior do cilindro, em especial no que diz respeito ao comportamento do combustível e à formação da chama. Para isso, é fundamental conhecer o relevo da cabeça do pistão, que por vezes não pode ser aproximado como uma superfície lisa. O mesmo se aplica às válvulas, cujos tamanhos e quantidades por cilindro variam de motor para motor. Deste modo, a Figura 22 ilustra o pistão e as válvulas de admissão (maior) e escape (menor) do motor utilizado neste estudo.



Figura 22: pistão e válvulas do motor Buffalo BDFE 10.0.

A modelagem do motor no ANSYS Forte® é feita por etapas, incluindo inserção de parâmetros gerais, desenho ou *upload* da geometria, geração de malha e definição de modelos e opções para o solver. Na Figura 23 apresenta-se a interface do ANSYS Forte® com um sistema de análise voltada para motores de combustão interna.

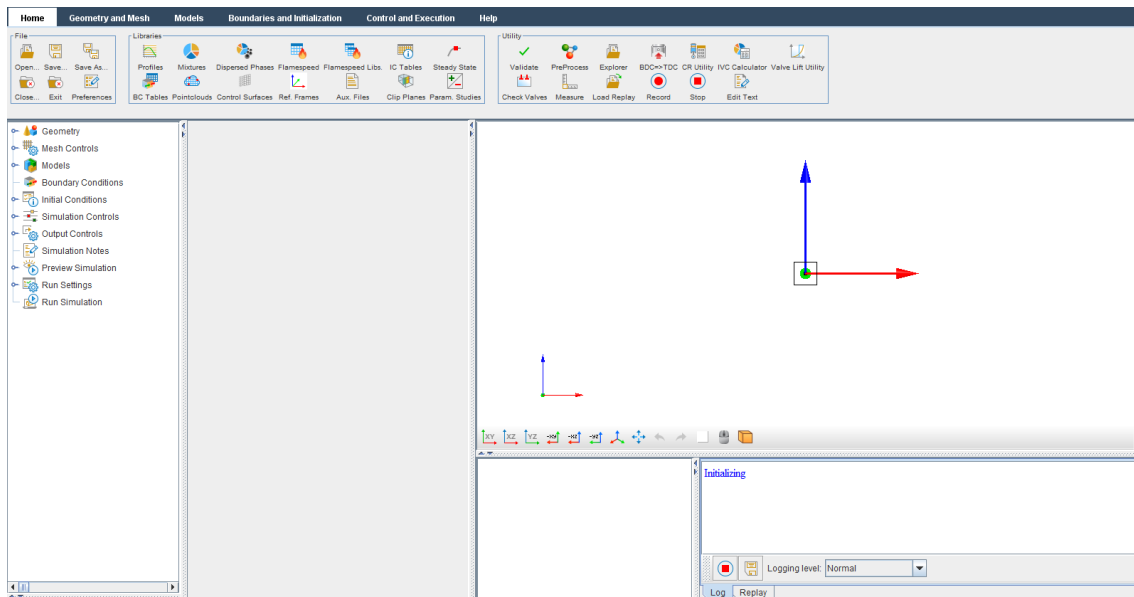


Figura 23: interface do ANSYS FORTE®.

O primeiro dado de entrada exigido pelo ANSYS Forte® é a geometria da câmara de combustão, que será usada para a geração de malha e representação do sistema de análise. A geometria deve ser reproduzida com precisão suficiente para reproduzir corretamente o espaço onde a combustão irá ocorrer. O *software* oferece algumas opções para importação ou geração da geometria, incluindo uma ferramenta própria para geração automática de setores de geometria a partir de parâmetros construtivos do motor e relações dimensionais de pistões. O *software* também é compatível com uma série de formatos de geometria, e aceita importação de desenhos tridimensionais feitos em ambiente CAD, como o SpaceClaim® (Figura 24), também pertencente ao pacote ANSYS®. Após a importação, regiões da geometria, como topo e lateral do cilindro, assim como a superfície da cabeça do pistão, são identificadas automaticamente pelo *software*, o que facilita a atribuição de parâmetros de entrada e a futura análise de dados. O setor de geometria deve ser proporcional à quantidade de furos do injetor, visto que a distribuição simétrica das parcelas de spray permite a simplificação da geometria completa do cilindro.

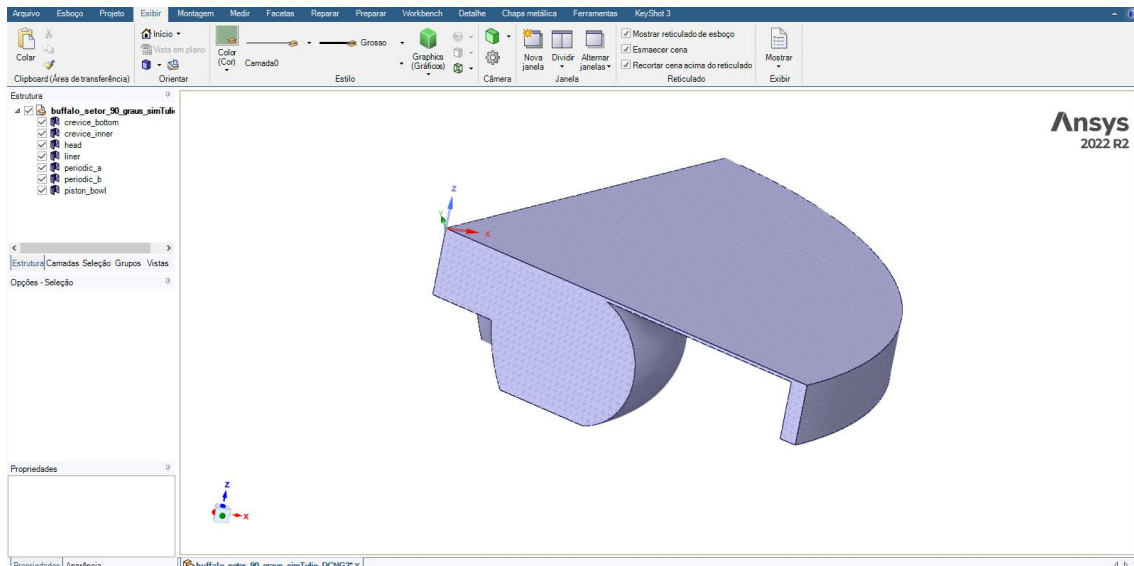


Figura 24: geometria da câmara de combustão do Buffalo BFDE 10.0 em ambiente ANSYS SpaceClaim®.

Após a finalização da geometria, é necessário desenvolver uma malha que contenha células suficientemente pequenas para garantir a convergência do problema. Neste sentido, a malha deve ser, ao mesmo tempo, suficientemente refinada, mas deve evitar um número excessivamente elevado de células, visto que a exigência computacional seria exageradamente grande. Uma malha automática pode ser gerada pelo *software* após o fornecimento de parâmetros básicos, sendo o tamanho global da malha o principal fator de ajuste inicial. Uma vez gerada uma malha com elementos triangulares, podem ser aplicados ajustes e refinamentos que garantam a confiabilidade dos resultados no menor tempo possível. É comum o uso de refinamentos adaptativos para gradientes de massa e temperatura, e atenção especial costuma ser direcionada às paredes e à região próxima da formação do spray de combustível. Para assegurar-se que a malha escolhida apresentava um número coerente de elementos, foi realizada uma análise de sensibilidade de malhas com 21,418, 134,936 e 574,248 elementos no ponto morto superior, sendo a malha de 134,936 elementos escolhida como melhor opção considerando o tempo computacional e a variabilidade de resultados em relação à malha mais refinada. A Figura 25 apresenta a malha da câmara de combustão do motor utilizado na presente tese.



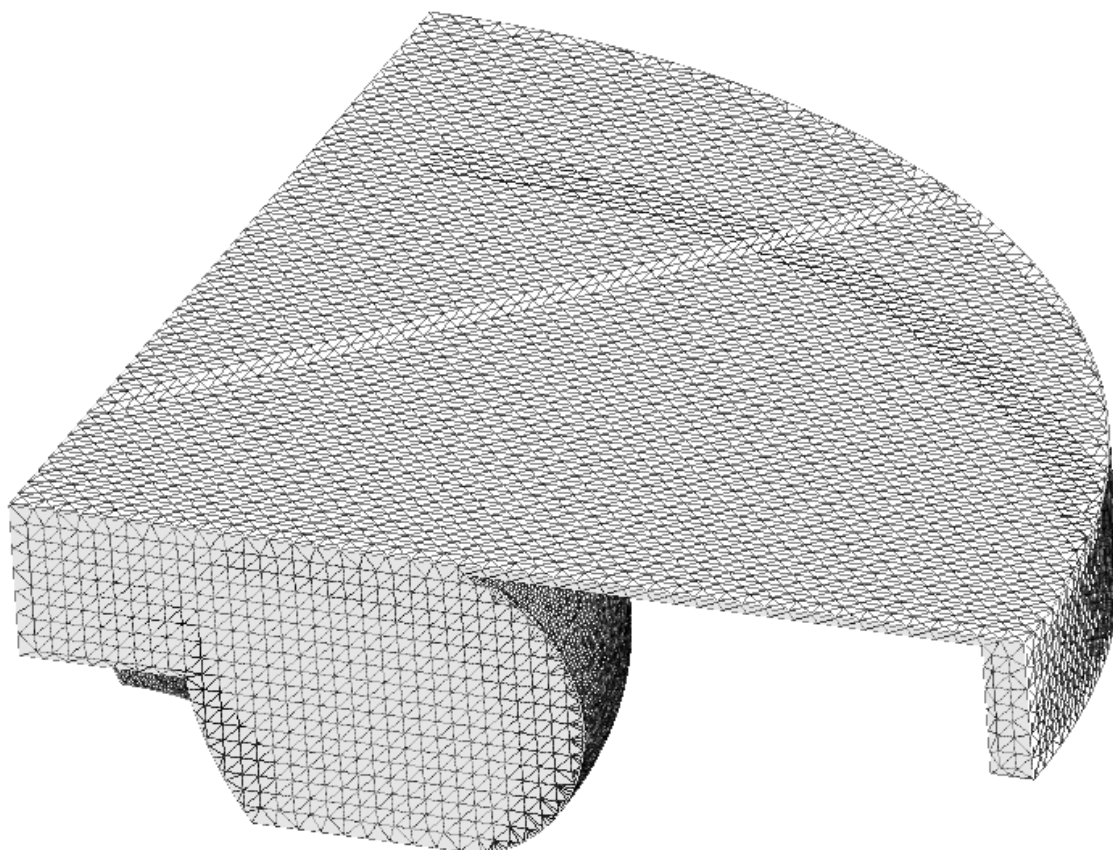


Figura 25: malha da câmara de combustão do Buffalo BFDE 10.0.

Uma vez definida a malha contendo as células a serem utilizadas na solução do problema, a etapa seguinte é a definição dos modelos a serem empregados. Esta escolha abrange dados de entrada e parâmetros de ajuste que são essenciais para a obtenção de resultados coerentes, e deve ser inserida com bom embasamento experimental e na literatura científica.

A aba de modelos é subdividida da seguinte forma:

- Química/materiais: inclui a escolha da Equação de estado, de modelo de mudança de fase e do mecanismo de cinética química. Existe também um modelo próprio para o cálculo da velocidade de chama.
- Transporte: inclui modelos para cálculos de propriedades de transportes do fluido, como viscosidade dinâmica e condutividade térmica, além de aceleração do corpo e modelos de turbulência e ajuste de coeficientes.
- Spray: abrange modelos de definição do spray de combustível, como colisão de partículas, vaporização, tipo de injeção (pulsada ou contínua) e condições de contorno (número de parcelas do spray, temperatura inicial, coeficiente de descarga, ângulo de cone, composição do

combustível, período e perfil de injeção). Também inclui modelos de quebra do spray, como os modelos de Kelvin-Helmholtz e Rayleigh-Taylor, e suas constantes de ajuste.

- Outras abas: o *software* fornece também ajuste de centelha (quando existente), modelo de estimativa de fuligem, compensação de folgas, fontes e radiação.

Em seguida, as condições de contorno são adicionadas à simulação, o que permite a caracterização de regiões pré-definidas da geometria, incluindo temperatura de paredes, modelos de transferência de calor e de atrito, bem como definição de movimentos de fronteira. De forma semelhante, as condições iniciais devem ser inseridas neste momento, com cuidado especial aos valores de pressão (medida experimentalmente) e temperatura (estimada por uma Equação de estado, devendo resultar em uma massa de ar coerente com os dados experimentais), conforme a Equação (31). Pequenos ajustes na pressão inicial são permitidos para ajuste da curva de pressão, de acordo com o manual de boas práticas do ANSYS Forte® (ANSYS Inc., 2022).

Parâmetros de tolerância e convergência podem ser ajustados na etapa final da preparação da simulação. Estes incluem alteração do passo temporal de iteração, de tolerâncias e condições de ativação do *solver* de cinética química, bem como adaptação de soluções para modelos de transporte. Na sequência, o controle de saída permite a escolha de dados a serem salvos e exportados, incluindo dados para posterior elaboração de figuras tridimensionais no *software* de pós-processamento. Por fim, é possível ajustar condições de solução computacional, como número de cálculos paralelos, e inicial a resolução do problema CFD.

## 6 RESULTADOS

Esse capítulo apresenta os principais resultados referentes a cada uma das etapas do estudo, tanto experimentais quanto numéricas. Serão apresentados os resultados para a operação *dual fuel* com biogás, biometano e syngas proveniente da gaseificação de madeira, em operação tanto com diesel quanto com HVO.

### 6.1 Resultados experimentais

Os experimentos em laboratório resultaram em valores de consumo de combustível (tanto primário quanto secundário), comportamento da pressão em função do ângulo do virabrequim e emissões de CO<sub>2</sub>, CO, NO<sub>x</sub>, material particulado e hidrocarbonetos não queimados. Nas Tabela 8 e 9 são apresentados apenas os dados obtidos diretamente por meio dos testes realizados no Laboratório de Máquinas Térmicas – LMT da UNIFEI e, que servirão como base para o posterior cálculo de demais parâmetros associados à performance do motor para operação com diesel e HVO, respectivamente. Vale ressaltar que os parâmetros fixados durante a etapa experimental, como rotação (1800 rpm) e torque (10 Nm), foram omitidos das tabelas. Para a presente tese, serão apresentados os dados referentes à operação *single* e *dual fuel* com diesel e HVO com biometano, biogás e syngas.

Tabela 8: Dados experimentais para operação *dual fuel* com diesel

Comb. Secundário	N° do teste	$m_{gas}$	$m_{ar}$	$EF$	$\lambda$	$T_{amb}$	$T_{adm}$	$T_{esc}$	$T_{óleo}$	$P_{esc}$	UR	$P_{amb}$	$NO_x$	CO	$CO_2$	HC	Opac.
	Unidade	kg/h	kg/h	%	-	°C	°C	°C	°C	mbar	%	kPa	ppm	%	%	ppm	$m^{-1}$
Biometano	1	0,00	20,705	0,00	2,085	26,5	26,6	321,6	52,8	102	47,17	92,5	907,00	0,21	6,50	30	0,260
	2	0,10	20,613	15,20	1,975	26,9	26,8	317,7	56,6	104	46,61	92,5	903,00	0,21	6,30	331	0,160
	3	0,25	20,653	36,28	1,883	27,2	26,8	310,7	59,8	102	46,53	92,5	972,00	0,25	6,00	784	0,080
	4	0,40	20,483	56,15	1,801	27,2	27,0	305,7	61,8	100	46,41	92,5	962,00	0,30	5,80	1212	0,055
Biogás	1	0,00	19,901	0,00	2,011	32,2	31,9	325,5	66,2	98	33,23	92,5	1008,00	0,19	6,20	29	0,230
	2	0,20	20,232	13,09	1,945	32,2	32,3	325,1	68,3	99	33,37	92,5	964,50	0,21	6,30	232	0,130
	3	0,50	19,617	31,77	1,823	32,8	32,6	318,5	70,1	97	33,11	92,5	968,00	0,21	6,40	484	0,050
	4	0,80	19,421	48,97	1,732	32,6	32,6	313,0	72,0	95	32,97	92,5	879,50	0,23	6,55	672	0,030
Syngas	1	0,00	20,946	0,00	2,099	25,0	25,0	306,1	65,7	99	34,53	92,5	994,00	0,13	6,40	19	0,260
	2	0,50	20,885	6,67	1,976	25,6	25,4	304,8	66,9	90	34,45	92,5	913,00	0,32	6,77	47	0,190
	3	1,00	20,529	13,18	1,933	25,6	25,5	304,5	67,5	98	34,32	92,5	852,67	0,50	7,20	69	0,160
	4	1,50	19,814	19,62	1,866	25,7	25,6	304,9	67,6	98	33,75	92,5	803,33	0,63	7,60	89	0,140

Tabela 9: Dados experimentais para operação *dual fuel* com HVO

Comb. Secundário	N° do teste	$m_{gas}$	$m_{ar}$	$EF$	$\lambda$	$T_{amb}$	$T_{adm}$	$T_{esc}$	$T_{\acute{o}leo}$	$P_{esc}$	UR	$P_{amb}$	$NO_x$	CO	$CO_2$	HC	Opac
	Unidade	kg/h	kg/h	%	-	°C	°C	°C	°C	mbar	%	kPa	ppm	%	%	ppm	$m^{-1}$
Biometano	1	0,000	20,552	0,00	2,063	28,1	28,1	324,8	69,0	101	44,60	92,5	844,00	0,09	6,35	15	0,100
	2	0,100	20,472	15,20	1,961	28,2	28,1	324,4	69,8	100	45,05	92,5	784,00	0,17	6,20	322	0,120
	3	0,250	20,405	36,28	1,866	28,5	28,4	310,8	70,1	98	44,33	92,5	801,50	0,24	5,95	784	0,080
	4	0,400	20,185	56,15	1,774	28,7	28,6	314,3	70,8	96	44,33	92,5	736,00	0,34	5,60	1277	0,040
Biogás	1	0,000	19,963	0,00	1,997	33,1	33,0	330,8	74,5	99	32,02	92,5	920,50	0,08	5,95	17	0,110
	2	0,200	20,378	13,09	1,931	32,9	33,0	329,1	74,6	101	32,86	92,5	839,67	0,15	6,10	238	0,090
	3	0,500	19,901	31,77	1,816	33,3	33,7	323,6	75,5	96	33,55	92,5	757,50	0,19	6,30	487	0,080
	4	0,650	19,598	48,97	1,780	33,0	33,5	319,2	76,1	95	32,67	92,5	690,50	0,21	6,30	600	0,050
Syngas	1	0,00	20,679	0,00	2,135	25,5	25,6	299,5	69,2	98	31,90	92,5	903,67	0,05	6,07	13	0,120
	2	0,50	20,434	6,67	2,009	25,9	25,9	300,6	69,2	96	31,66	92,5	787,00	0,28	6,50	40	0,150
	3	1,00	20,108	13,18	1,939	25,9	26,1	302,7	69,1	98	31,57	92,5	713,33	0,46	6,90	68	0,130
	4	1,50	19,825	19,62	1,859	26,1	26,0	304,5	69,2	96	31,56	92,5	644,33	0,64	7,40	88	0,130

Seguindo a metodologia apresentada no item 4.2, parâmetros operacionais do motor foram calculados a partir dos dados medidos em laboratório, apresentados pelas Tabela 8 e 9. Estes valores calculados conforme a análise metodológica, e que são apresentados na Tabela 10, são necessários para o desenvolvimento de análises posteriores, como a avaliação da combustão, de eficiência e de emissões. Estes cálculos iniciais também fornecem o consumo de diesel e HVO, informações essenciais para a análise CFD.

Ao longo dos próximos itens, os resultados obtidos na Tabela 10 serão utilizados para análises detalhadas do funcionamento do motor em modo *dual fuel*, e serão associados aos demais resultados experimentais e numéricos para uma melhor compreensão dos padrões de emissões, performance e de combustão.

Além das informações apresentadas na Tabela 10, podem ser estimadas, ainda, as características da combustão observada em cada caso. Estes parâmetros foram calculados com base nas curvas de HRR, seguindo a metodologia descrita por Heywood (2018):

- O início da injeção (SOI) é estimado no ângulo do virabrequim em que a taxa de liberação de calor apresenta, antes do início da combustão, uma queda brusca em seu valor, indicando a entrada de um combustível frio em uma zona de ar quente e comprimido;
- O início da combustão (SOC) é considerado como o momento em que as curvas de HRR assumem um valor positivo pela primeira vez;

Tabela 10: Cálculos iniciais para operação *dual fuel*.

Combustível	N° do teste Unidade	Pot kW	DIESEL <i>dual fuel</i>						HVO <i>dual fuel</i>						
			$\dot{m}_{diesel}$ kg/h	EF %	$\dot{m}_{exh}$ kg/h	$p_{vapor}$ Pa	$p_{sat}$ Pa	$\dot{m}_{ar\ seco}$ kg/h	Pot kW	$\dot{m}_{HVO}$ kg/h	EF %	$\dot{m}_{exh}$ kg/h	$p_{vapor}$ Pa	$p_{sat}$ Pa	$\dot{m}_{ar\ seco}$ kg/h
Biometano	1	1,87	0,699	0,00	21,40	1634	3463	20,48	1,91	0,665	0,00	21,22	1697	3804	20,32
	2	1,87	0,621	15,20	21,33	1653	3546	20,38	1,90	0,590	15,34	21,16	1723	3826	20,23
	3	1,87	0,489	36,28	21,39	1679	3609	20,42	1,91	0,462	36,66	21,12	1726	3893	20,17
	4	1,90	0,348	56,15	21,23	1675	3609	20,25	1,91	0,330	56,44	20,92	1746	3939	19,95
Biogás	1	1,88	0,696	0,00	20,60	1599	4812	19,69	1,91	0,668	0,00	20,63	1621	5062	19,74
	2	1,87	0,634	13,09	21,07	1606	4812	20,01	1,91	0,612	13,04	21,19	1645	5005	20,15
	3	1,86	0,513	31,77	20,63	1648	4977	19,40	1,91	0,500	31,44	20,90	1717	5119	19,67
	4	1,85	0,398	48,97	20,62	1622	4921	19,21	1,86	0,434	40,72	20,68	1644	5033	19,38
Syngas	1	1,87	0,702	0,00	21,65	1094	3169	20,79	1,88	0,647	0,00	21,33	1041	3264	20,53
	2	1,87	0,699	6,67	22,08	1131	3284	20,73	1,88	0,637	7,01	21,57	1058	3343	20,29
	3	1,87	0,659	13,18	22,19	1127	3284	20,37	1,87	0,608	13,63	21,72	1055	3343	19,96
	4	1,85	0,614	19,62	21,93	1115	3303	19,66	1,86	0,586	19,72	21,91	1068	3383	19,68

- O atraso de ignição (ID) é a diferença, em ângulos do virabrequim, entre SOI e SOC;
- A duração da combustão pré-misturada (PCD) é dada pela diferença entre SOC e o primeiro mínimo local da curva de HRR após o ponto máximo;
- A duração da combustão difusa (DCD) é dada pela diferença entre o fim da combustão pré-misturada e o momento em que 90% do combustível são queimados (MBF90).
- A duração total da combustão (CD) é a soma das durações pré-misturada e difusa.

Estes parâmetros são representados na Figura 26 e os respectivos resultados são apresentados na Tabela 11.



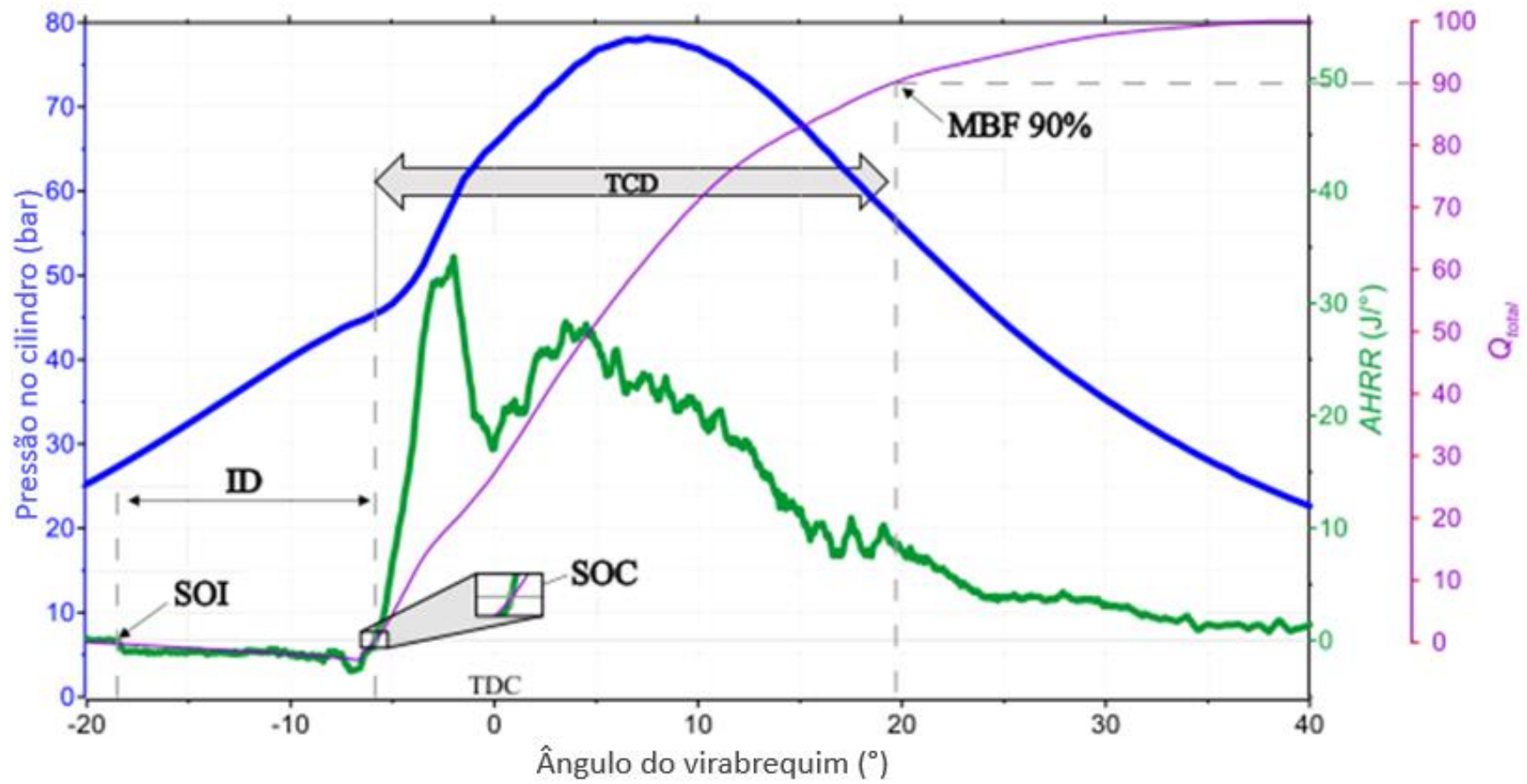


Figura 26: principais parâmetros de combustão do motor (PINTO et al., 2023b).

Tabela 11: Análise da combustão para operação *dual fuel*.

Combustível	Nº do teste Unidade	Diesel <i>dual fuel</i>						HVO <i>dual fuel</i>					
		SOI	SOC	ID	PCD	DCD	CD	SOI	SOC	ID	PCD	DCD	CD
Ângulo do virabrequim (°CAD)													
Biometano	1	-18,3	-5,4	-12,9	7,4	16,4	23,8	-17,4	-5,5	-11,9	5,5	18,9	24,4
	2	-18,3	-5,3	-13,0	7,8	15,1	22,9	-17,4	-5,0	-12,4	6,0	17,6	23,6
	3	-18,3	-5,0	-13,3	6,5	14,7	21,2	-17,4	-4,8	-12,6	5,9	16,8	22,7
	4	-18,3	-4,9	-13,4	6,9	13,7	20,6	-17,4	-4,7	-12,7	6,2	16,4	22,6
Biogás	1	-18,3	-5,3	-13,0	7,8	15,9	23,7	-17,4	-5,3	-12,1	5,7	18,7	24,4
	2	-18,3	-5,2	-13,1	7,7	15,6	23,3	-17,4	-4,9	-12,5	5,9	17,9	23,8
	3	-18,3	-4,8	-13,5	6,3	15,5	21,8	-17,4	-4,5	-12,9	6,1	16,9	23
	4	-18,3	-4,7	-13,6	6,2	15,0	21,2	-17,4	-4,3	-13,1	6,7	16,1	22,8
Syngas	1	-18,3	-5,1	-13,2	7,6	16,2	23,8	-17,4	-5,5	-11,9	5,5	24,0	29,5
	2	-18,3	-4,9	-13,4	6,4	16,7	23,1	-17,4	-5,4	-12,0	5,8	24,1	29,9
	3	-18,3	-4,7	-13,6	7,7	14,4	22,1	-17,4	-5,4	-12,0	6,0	24,1	30,1
	4	-18,3	-4,6	-13,7	7,6	14,3	21,9	-17,4	-5,0	-12,4	6,1	23,8	29,9

## 6.2 Análise de eficiência

A avaliação da eficiência de eixo do motor resultou em valores naturalmente baixos em relação a motores diesel mais modernos, o que se deve ao fato de o motor Buffalo BFDE ser um motor mais simples, monocilíndrico e aspirado. Todavia, independentemente dos valores obtidos, os resultados experimentais fornecem uma comparação direta da eficiência do motor em diferentes condições operacionais. Como pode ser observado na Figura 27, a operação *dual fuel* reduziu a eficiência de forma proporcional à taxa de substituição energética do combustível secundário. O uso de biometano apresentou uma redução menos acentuada, com uma redução de 10.7% para a maior substituição testada (56.15%), enquanto o biogás levou a uma perda de eficiência levemente mais expressiva, com redução de 12.1% quando a 48.97% de substituição. Este resultado é possivelmente justificado pela maior presença de CO<sub>2</sub> no biogás, que absorve parte do calor liberado pela combustão, reduz a eficiência volumétrica e não contribui para a liberação de calor. A mesma explicação se aplica aos resultados observados para a operação *dual fuel* com syngas, que resultou em uma queda de 9,2% na eficiência com apenas 19,62% de substituição. Assim como o biogás, o syngas utilizado apresenta grande concentração de gases não combustíveis, como CO<sub>2</sub> (13,5%) e N<sub>2</sub> (52,1%).

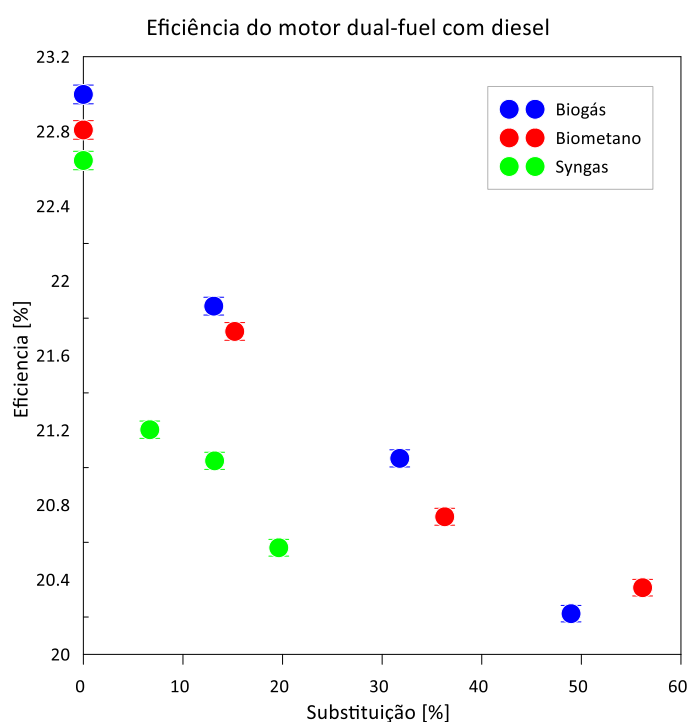


Figura 27: eficiência de eixo do motor operando com diesel.

Para a operação com HVO, foi observada uma tendência semelhante à operação com diesel, com o modo *dual fuel* provocando uma redução de eficiência à medida que mais combustível secundário foi injetado. Assim como na Figura 27, na Figura 28 é indicada uma queda mais suave na eficiência quando biometano é injetado na linha de admissão, tendo uma redução de 12,5% para uma substituição de 56,44%. Ao mesmo tempo, o uso de biogás e syngas levou a uma redução de 11,3% e 12,3% com substituições de 40,72% e 19,72%, respectivamente. Novamente, a aplicação de combustíveis com altas concentrações de gases inertes, como CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub>, levou a uma perda mais acentuada da eficiência, ao contrário do observado para operação com altas concentrações de metano.

Além disso, uma importante observação é a maior eficiência constatada quando o diesel convencional foi substituído por HVO. Em operação *single fuel*, o uso da alternativa renovável levou a um acréscimo médio de 3,3% na eficiência do motor, indicando que o HVO pode trazer benefícios diretos mesmo em motores mais simples, não-otimizados e projetados para operação com diesel. Possíveis explicações para esta constatação são o menor atraso de ignição e maior número de cetano do HVO, que leva a uma combustão mais homogênea e reduz perdas durante sua queima.

Resultados semelhantes já foram relatados em estudos anteriores, e reforçam o potencial do uso deste combustível verde em motores comerciais. O aumento de eficiência associado à substituição de diesel por HVO já foi reportado por da Costa et al. (2022) em um motor monocilíndrico operando em carga parcial, tanto em modo *single fuel* como *dual fuel*. De forma similar, Jaroonjitsathian et al. (2014) observaram incrementos na eficiência de um motor diesel turbo Euro III de 86 kW.

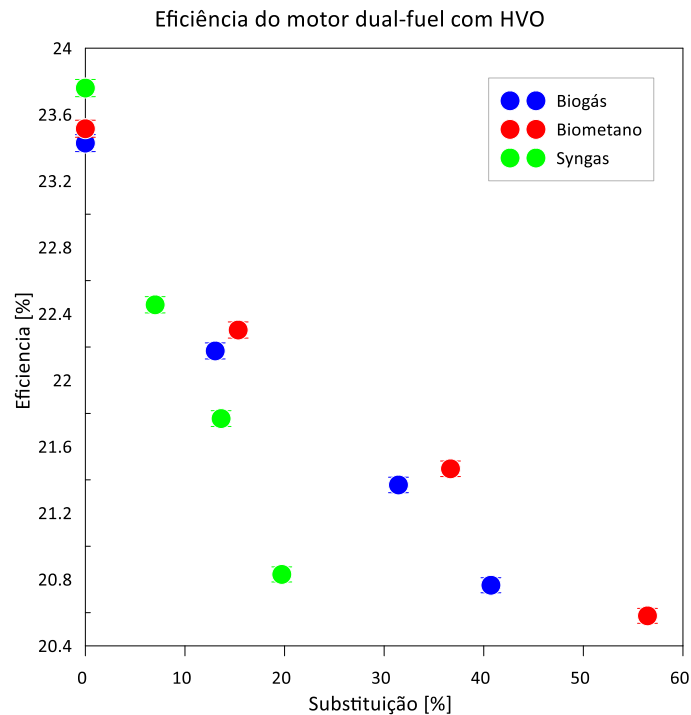


Figura 28: eficiência de eixo do motor operando com HVO.

### 6.3 Validação do modelo computacional

A análise da combustão, apresentada no item 6.1 é realizada a partir da análise das curvas de pressão no interior do cilindro, que são obtidas experimentalmente por meio de um *encoder* óptico associado a uma roda fônica, que correlaciona a pressão interna à posição do cilindro em ângulos do virabrequim. Estas curvas são relevantes tanto para a obtenção do padrão de liberação de calor (curvas HRR), como para a validação do modelo CFD, uma vez que a correta reprodução da pressão assegura que a análise de combustão será baseada em dados confiáveis.

Neste sentido, as curvas de HRR são calculadas conforme a Equação (30) a partir dos dados experimentais de pressão para cada ângulo do virabrequim. Na Figura 29 é apresentada a comparação das curvas de pressão e HRR para condições selecionadas de diesel em operação *single fuel* e *dual fuel* com biogás, biometano e syngas. De forma geral, o modelo do ANSYS Forte® foi capaz de reproduzir corretamente os resultados experimentais, com pequenos erros observados nos valores de pressão e uma boa predição das curvas de HRR e suas etapas de combustão. Para todas as condições testadas,

observa-se que parâmetros representativos da combustão, como início, fim e pico máximo de pressão são bastante próximos dos valores experimentais, indicando a boa confiabilidade do modelo. A título de exemplo, todas as pressões de pico obtidas numericamente resultaram em um erro menor que 5%.

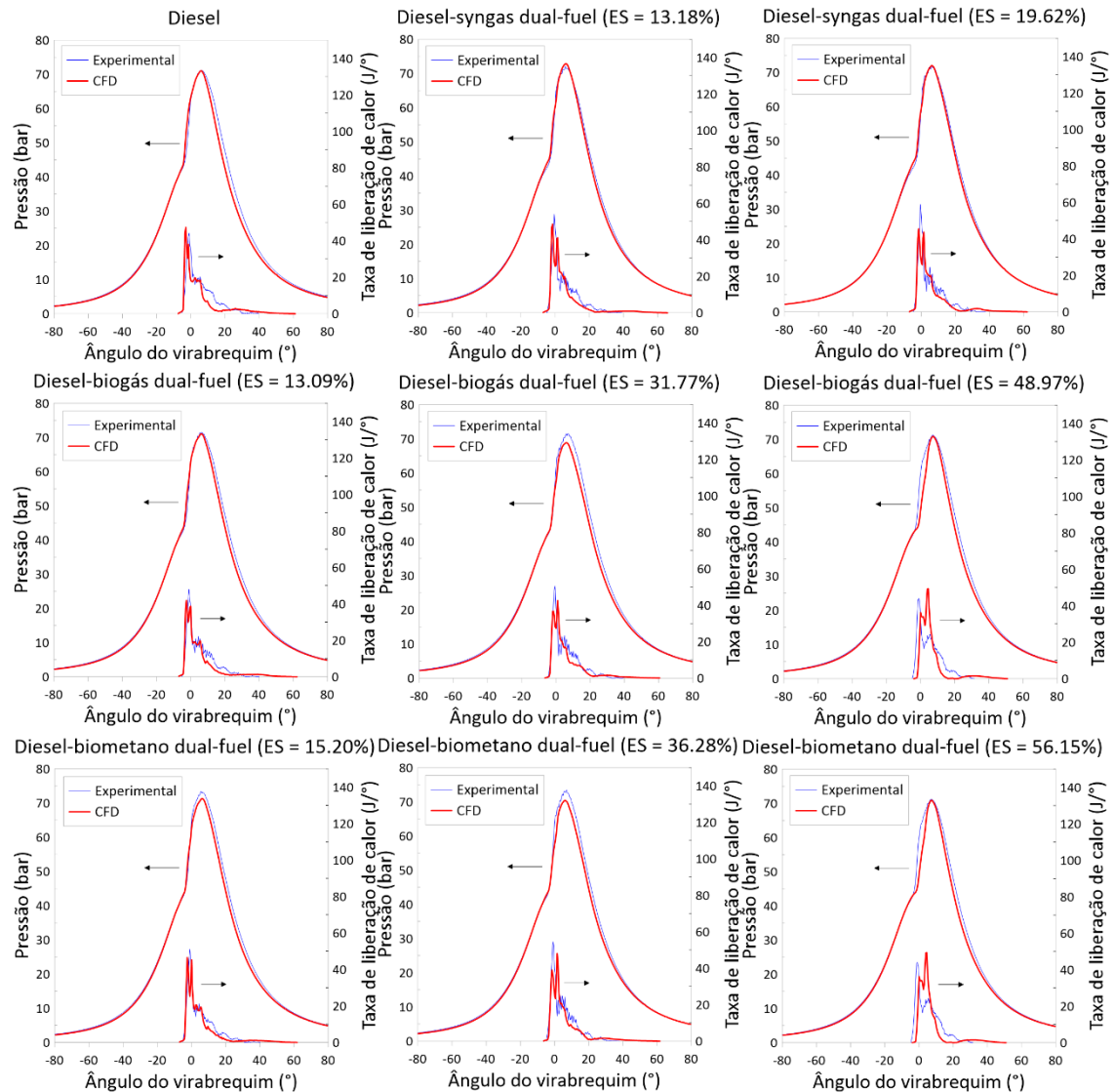


Figura 29: comparação das curvas de pressão e de liberação de calor do diesel obtidas experimentalmente e no modelo do ANSYS Forte®.

Da mesma forma, as predições de pressão e liberação de calor para o HVO foram bastante satisfatórias para toda a faixa testada, conforme apresentado na Figura 30. A taxas maiores de substituição com biometano e biogás, o início da combustão, caracterizado pelo aumento súbito da pressão e das curvas de HRR, foi levemente superestimado no modelo computacional, porém ainda representando um desvio suficientemente baixo no desenvolvimento das curvas. Para as condições testadas, um computador laptop

equipado com processador AMD Ryzen 3 Mobile 5300U® e 16 GB de memória RAM levou cerca de 8 horas para realização de cada condição.

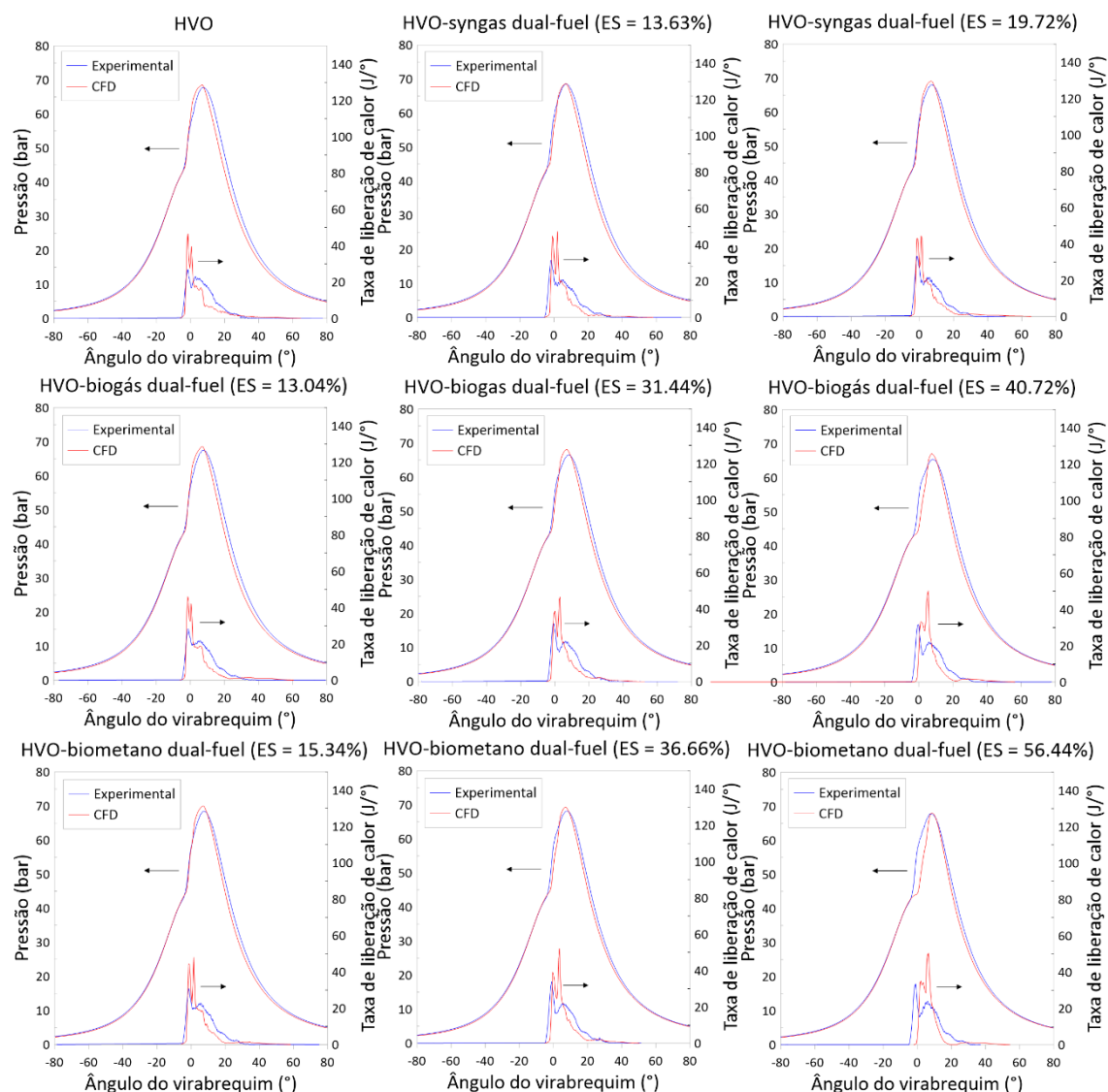


Figura 30: comparação das curvas de pressão e de liberação de calor do HVO obtidas experimentalmente e no modelo do ANSYS Forte®.

#### 6.4 Análise de temperatura

A análise de temperatura no interior do cilindro é realizada por meio de parâmetros já conhecidos, conforme a metodologia apresentada na Equação (31). Desta forma, é possível comparar os valores de temperatura média no cilindro para todos os casos testados, o que é apresentado na Figura 31. Como pode ser observado, a temperatura de combustão é coerente com valores da literatura (da Costa *et al.*, 2022; Pinto *et al.*, 2023) e aumenta gradativamente

durante o estágio de compressão, apresentando um salto abrupto pouco após a injeção, o que marca o início da combustão. Existem também variações naturais da temperatura pré-combustão, o que depende de condições ambientais e da inércia térmica do motor, e interferem diretamente no comportamento da combustão.

Apesar das variações nas condições iniciais, a comparação de diferentes modos de operação – desde que realizados sob as mesmas condições – pode contribuir para o entendimento da formação de poluentes e de como a presença de combustíveis secundários interfere no desenvolvimento da combustão. A operação *dual fuel* com biogás, por exemplo, levou a uma redução gradual da temperatura à medida que a taxa de substituição foi elevada. Se para o diesel puro foi observado um pico de 1482 K, a combustão com 31,77% de biogás alterou este valor para 1303 K, uma redução de 12,1%. De maneira similar, a operação *dual fuel* HVO-biogás levou a uma redução de 6,3% para a máxima taxa de substituição. A redução de temperatura causada pelo biogás se deve, naturalmente, à sua composição rica em gases não queimáveis, como o CO<sub>2</sub>. Além de não contribuir com a combustão, o CO<sub>2</sub> ainda reduz a eficiência volumétrica e absorve parte do calor liberado, o que contribui para uma redução observável da temperatura no cilindro.

A operação com biometano, por sua vez, levou a um efeito mais discreto de alteração na temperatura. Se para o modo *dual fuel* com diesel foi observado um aumento gradual da temperatura com o aumento da taxa de substituição, a operação com HVO apenas apresentou este efeito para taxas de substituição mais elevadas. Ao se comparar os picos de temperatura para HVO puro e com 36,66% de biometano, nota-se uma diferença mínima (<0,1%), o que pode ser explicado por pequenas alterações da condição ambiente no momento dos testes, associado à proximidade entre as temperaturas de chama adiabática do diesel e do metano (principal constituinte do biometano).

Já o uso de syngas em modo *dual fuel* foi associado a menores temperaturas de combustão, com reduções de 13,6% para diesel e 18,0% para HVO. De forma similar ao resultado observado para o biogás, a redução de temperatura causada pela presença de syngas está associada à presença de gases não combustíveis, em especial o CO<sub>2</sub> e o N<sub>2</sub>. Este efeito do syngas sobre



a temperatura já foi observado na literatura, e representa um resultado esperado para esta classe de combustíveis (OLANREWAJU et al., 2022).

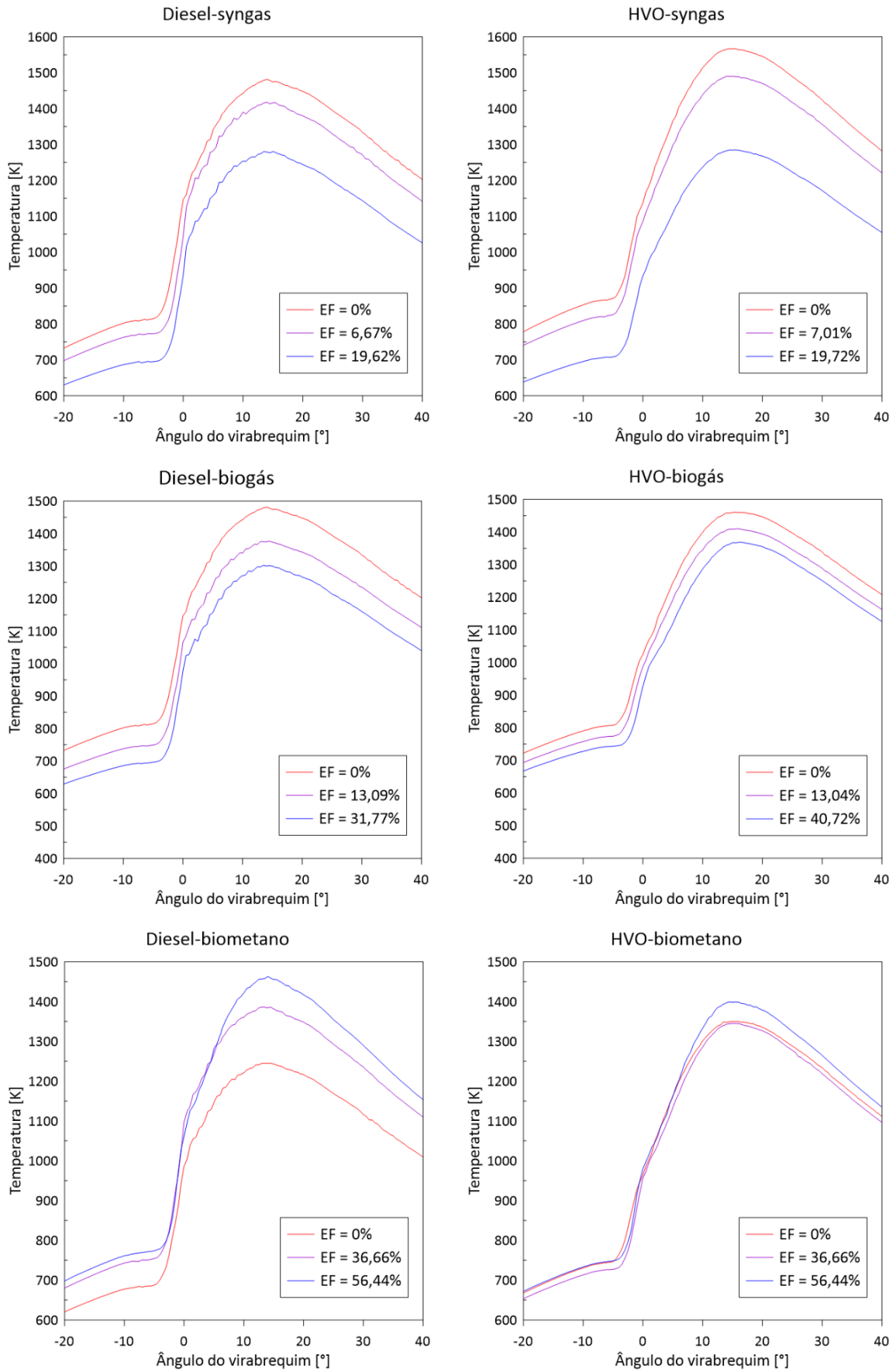


Figura 31: estimativa de temperaturas no interior do cilindro.

Por meio da análise computacional em ANSYS Forte®, é possível obter ainda mais informações sobre as temperaturas no cilindro em diversas condições de operação. A distribuição de temperaturas está diretamente relacionada ao início da combustão, que ajuda a compreender como cada combustível secundário afeta a velocidade com a qual as reações ocorrem. Na Figura 32 são ilustrados estes resultados para a operação *dual fuel* diesel-syngas, indicando a partir de quais ângulos do virabrequim os núcleos de alta temperatura passam a existir, e em que local da câmara de combustão este fenômeno ocorre. É possível observar que, à medida que mais syngas é adicionado ao pórtico de admissão, a combustão tende a ocorrer mais tardiamente, em um efeito que parece ser diretamente proporcional à taxa de substituição de energia.

A mesma tendência é observada para a operação HVO-syngas (Figura 33), embora o efeito do atraso seja menos evidente entre diferentes taxas de substituição. Isto ocorre pois o HVO já apresenta, por si só, um efeito de atraso na combustão, o que acaba por sobrepor parcialmente o atraso causado pela adição de syngas. Conforme discutido, o atraso de combustão observado para o HVO parece estar mais associado às suas propriedades físicas, que atrasam o início da ignição, do que às propriedades químicas, uma vez que o atraso de ignição do HVO é frequentemente menor que do diesel comercial.

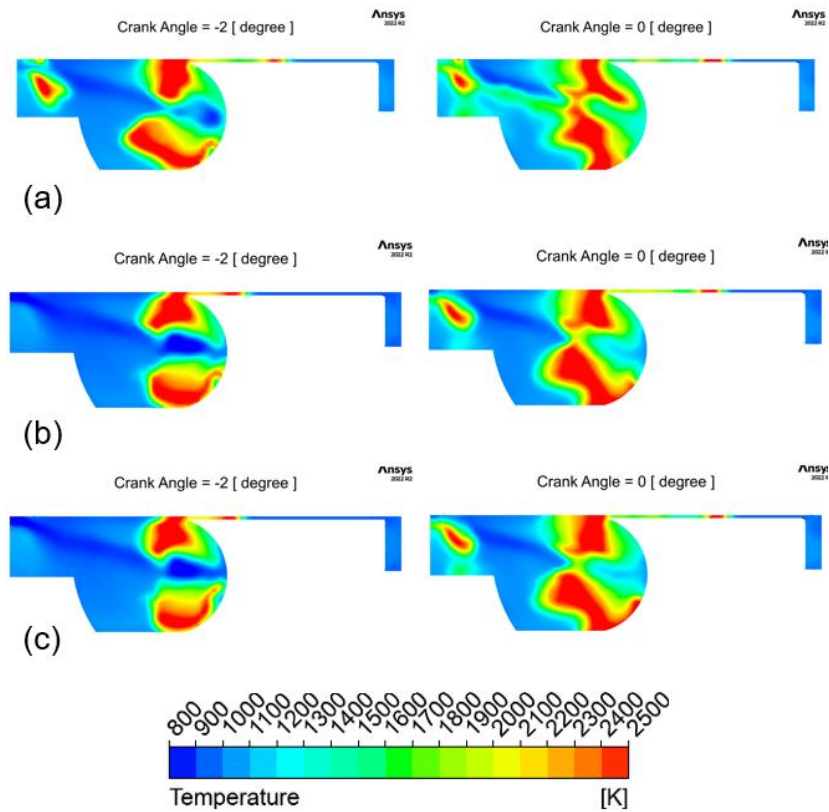


Figura 32: início da combustão para diesel-syngas: (a) *single fuel*, (b) EF = 13.18%, (c) EF = 19.62%.

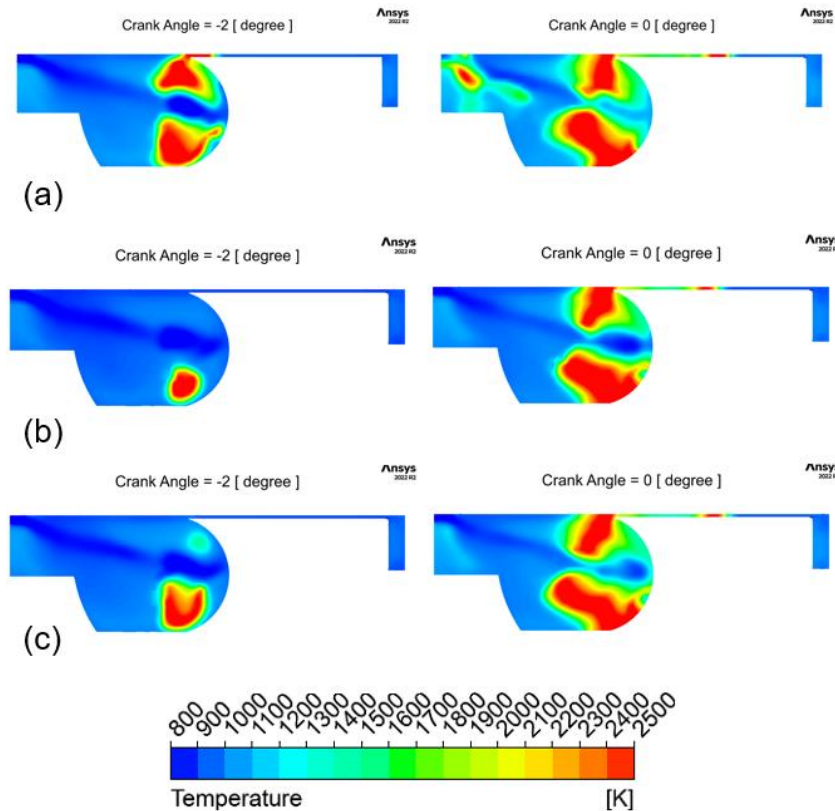


Figura 33: início da combustão para HVO-syngas: (a) *single fuel*, (b) EF = 13.63%, (c) EF = 19.72%.

De forma análoga, a operação de diesel com biogás apresenta efeito similar, conforme apresentado pela Figura 34. Provavelmente em decorrência da presença de  $\text{CO}_2$  em sua composição, que não contribui com a combustão, absorve calor e reduz a eficiência volumétrica, o biogás prejudica o início da combustão, deslocando o fenômeno para ângulos mais avançados. Este atraso é ainda mais evidente quando o diesel é substituído por HVO. De fato, enquanto a operação diesel-biogás com 31% de substituição apresenta um atraso moderado a  $2^\circ$  do ponto morto superior, o uso de HVO em condições similares ainda não apresenta qualquer ponto de alta temperatura, indicando que a combustão sequer foi iniciada (Figura 35). Para a máxima taxa de substituição testada (aproximadamente 41%), os pontos de alta temperatura apenas começam a surgir após o PMS.

Apesar da maior concentração de metano, o mesmo efeito é observado também para o biometano, que apresenta mais dificuldade na combustão em relação ao diesel (Figura 36) e ao HVO (Figura 37), o que se deve à menor reatividade do metano quando comparado aos combustíveis-piloto utilizados.

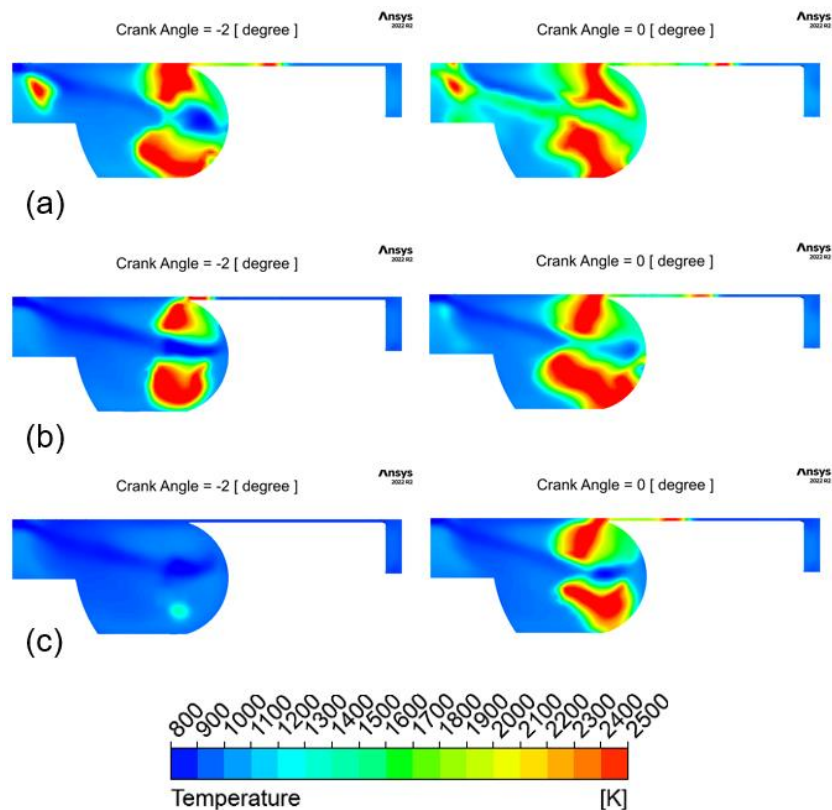


Figura 34: início da combustão para diesel-biogás: (a) *single fuel*, (b) EF = 31.77%, (c) EF = 48.97%.

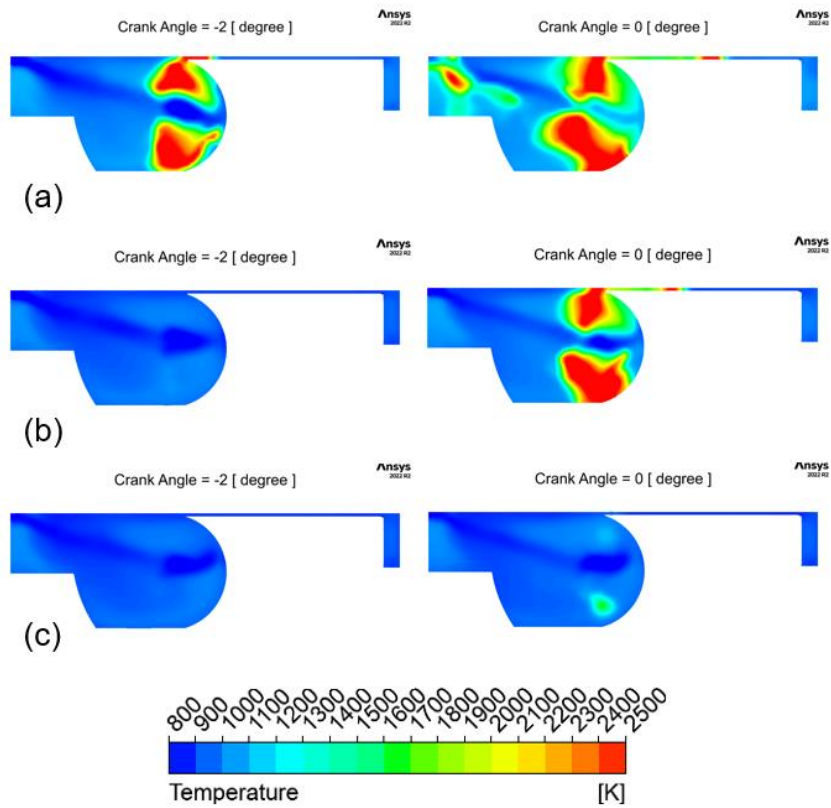


Figura 35: início da combustão para HVO-biogás: (a) *single fuel*, (b) EF = 31.44%, (c) EF = 40.72%.

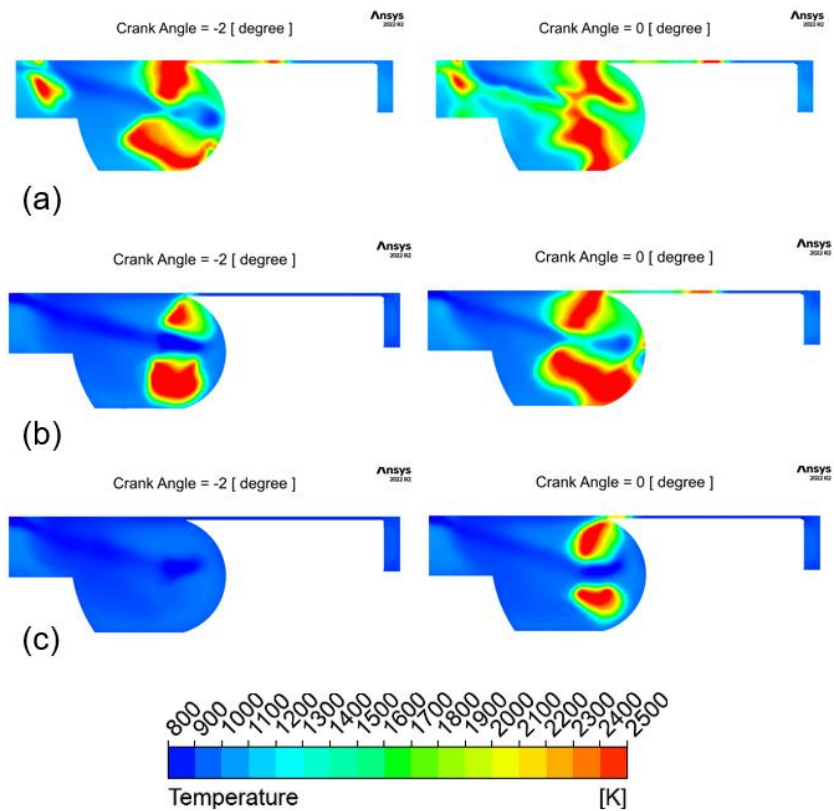


Figura 36: início da combustão para diesel-biometano: (a) *single fuel*, (b) EF = 36.28%, (c) EF = 56.15%.

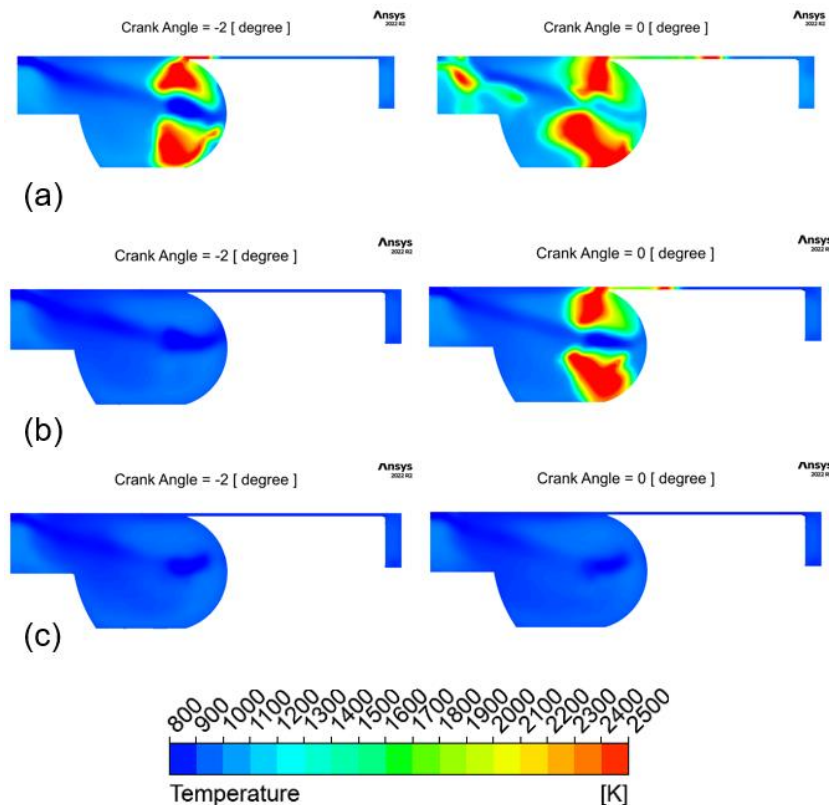


Figura 37: início da combustão para HVO-biometano: (a) *single fuel*, (b) EF = 36.66%, (c) EF = 56.44%.

Entre diesel e HVO, o mesmo padrão se confirma, com as combinações HVO-biometano apresentando o já discutido atraso em relação ao diesel.

## 6.5 Análise de emissões

Os óxidos de nitrogênio são poluentes cuja formação segue majoritariamente (porém não exclusivamente) mecanismos térmicos, e sua concentração está diretamente associada a queimas em altas temperaturas. Assim como observado na análise da eficiência de eixo, o uso de HVO apresentou benefícios também na análise de emissões. A análise das emissões de NO<sub>x</sub> (Figura 38) indicou que a operação com HVO, de maneira geral, apresentou menores valores em comparação ao diesel para todas as condições analisadas.

Como já discutido no item 6.4, a operação *dual fuel* com biogás leva a uma perceptível redução na temperatura do cilindro, o que inibe a formação e as emissões de NO<sub>x</sub>. Este resultado se assemelha ao uso da técnica de recirculação dos gases de exaustão (EGR), que visa controlar a emissão de

poluentes pelo aumento do teor de CO<sub>2</sub> na mistura. Este resultado já foi relatado em trabalhos anteriores, que correlacionaram a presença de gases inertes no biogás a uma consequente redução nas emissões de óxidos de nitrogênio (DE SOUZA et al., 2023). A redução de NO<sub>x</sub> na operação *dual fuel* com biogás também foi observada para a operação com HVO, assim como em publicações prévias apresentadas por Pinto et al. (2023b) e Rimkus et al (2020). Em sua taxa de substituição máxima, a operação *dual fuel* com biogás levou a uma redução média de 12.6% e 23.3% para diesel e HVO, respectivamente, indicando que o biogás pode ser uma alternativa renovável para redução de óxidos de nitrogênio.

A mesma tendência foi observada para a operação com syngas de madeira, que resultou em um decréscimo gradual nas emissões de NO<sub>x</sub> à medida que a taxa de substituição foi elevada. Na operação com diesel, a máxima taxa de substituição de syngas (19.6%) levou a uma redução de 17% nesse poluente, pouco abaixo da redução de 25.8% observada para operação com HVO. Assim como já discutido no item 6.4, este efeito decorre da presença de CO<sub>2</sub> e N<sub>2</sub> na composição do syngas, o que reduz a temperatura de combustão e dificulta a formação de NO<sub>x</sub> por meio de mecanismos térmicos. O uso de syngas como alternativa para redução destas emissões já foi verificado em estudos anteriores, que identificaram uma relação direta entre a concentração de gases inertes e a redução de óxidos de nitrogênio.

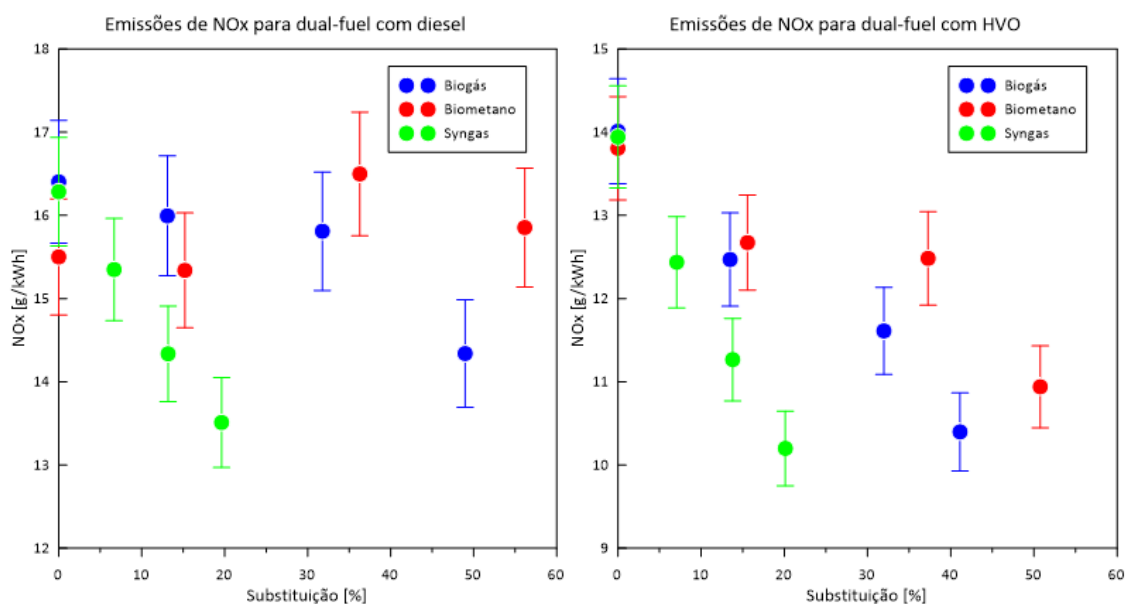


Figura 38: emissões específicas de NO<sub>x</sub> nos modos *single* e *dual fuel* para diesel e HVO.



Já as emissões de CO (Figura 39), por sua vez, apresentaram comportamento contrário às observadas para o NO<sub>x</sub>, com aumento proporcional à taxa de substituição dos combustíveis testados. Como se sabe, o CO é um indicativo de combustão incompleta, que pode sugerir que os combustíveis secundários dificultam a oxidação total do carbono, em especial para o syngas, cuja densidade energética e temperatura de combustão são menores. De fato, a operação com syngas elevou as emissões de CO em mais de 5 vezes para diesel e 13 vezes para HVO. Um fator adicional que contribui para este resultado é a própria composição do syngas utilizado, que por si só apresenta 13.1% de CO em volume.

Durante a operação *dual fuel* com biometano e biogás, também foi registrado um aumento nas emissões de CO, embora mais suave que para o syngas. Para o biometano, foi observado um aumento de 37% para o diesel e de 288% para o HVO, ambos com a máxima taxa de substituição testada. Já com o uso de biogás, os aumentos máximos foram de 18% para o diesel e de 185% para o HVO. É importante observar que, uma vez que as emissões de CO com HVO são menores que para o diesel, o efeito causado pelos combustíveis secundários se torna mais evidente, tendendo a aproximar a operação de ambos os combustíveis piloto em modo *dual fuel*.

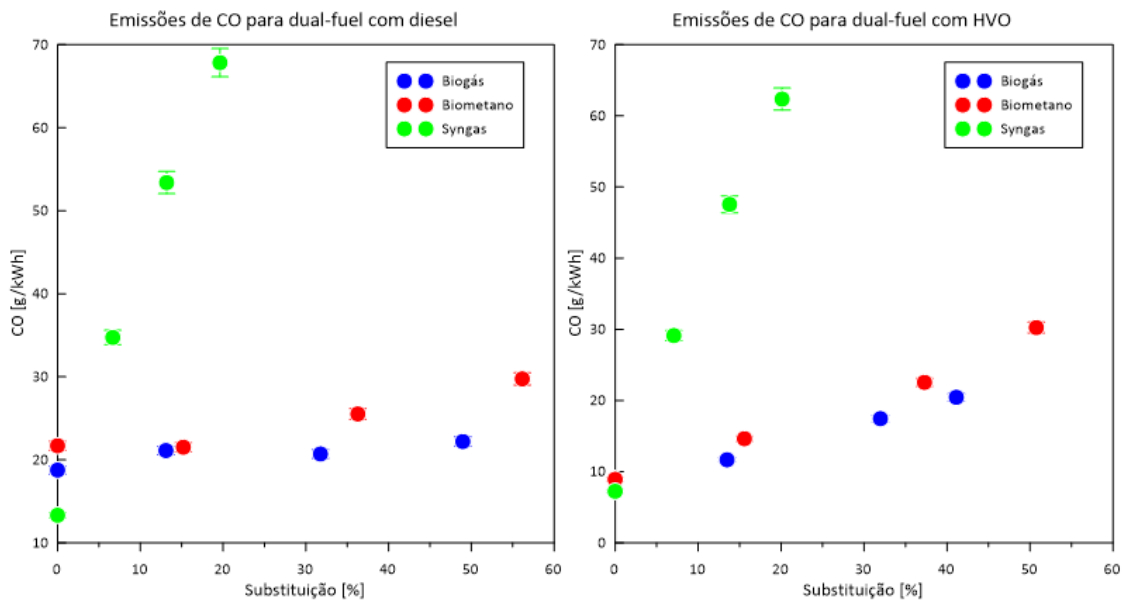


Figura 39: emissões específicas de CO nos modos *single* e *dual fuel* para diesel e HVO.

As emissões de CO<sub>2</sub> (Figura 40), por outro lado, apresentaram uma tendência até certo ponto relacionada à composição do combustível secundário: enquanto syngas e biogás foram associados a um aumento nas emissões tanto com diesel quanto com HVO, o biometano, composto majoritariamente por metano e, portanto, com uma menor relação carbono/hidrogênio, apresentou reduções de até 14% com diesel e HVO. A maior taxa de aumento de CO<sub>2</sub> foi observada para o syngas, visto que sua parcela combustível é majoritariamente composta por CO, com menores parcelas de CH<sub>4</sub> e H<sub>2</sub>. Neste sentido, a maior relação carbono/hidrogênio do syngas em relação ao biogás e, principalmente, ao biometano, justifica a tendência de resultados observada.

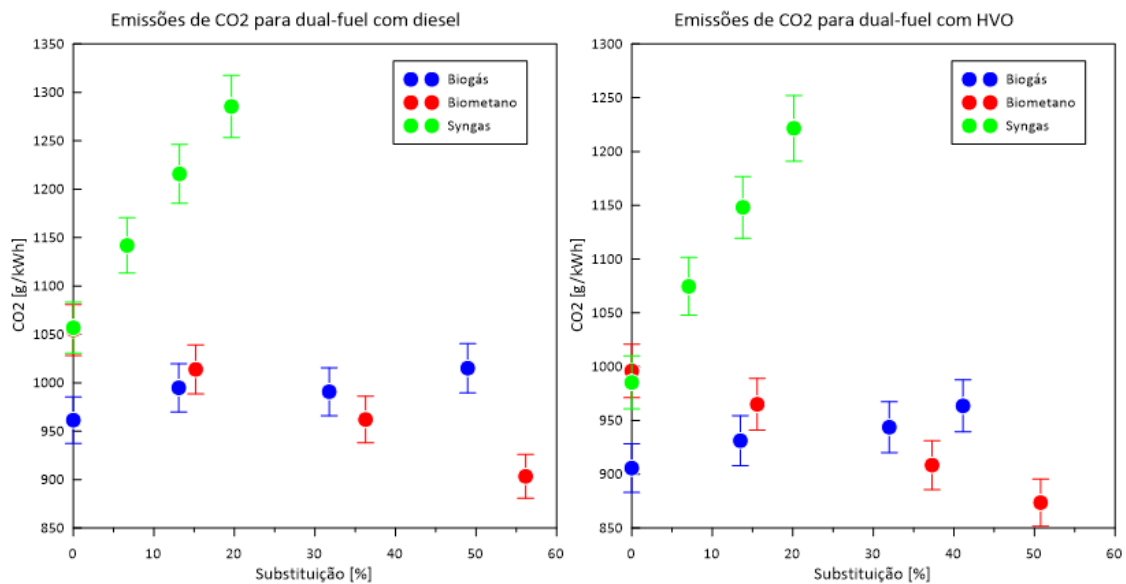


Figura 40: emissões específicas de CO<sub>2</sub> nos modos *single* e *dual fuel* para diesel e HVO.

Por fim, as emissões de material particulado (Figura 41) também foram bastante reduzidas durante a operação *dual fuel*. Para a operação com diesel, foi observada uma redução de até 86% para biogás, 79% para biometano e 45% para syngas. Neste sentido, a redução de particulado está associada à redução do consumo de diesel durante a operação *dual fuel*. No caso do uso de HVO, devido à sua estrutura parafínica e propriedades superiores de queima, as emissões de material particulado já são inicialmente mais baixas que as do diesel, e foram ainda mais reduzidas durante a operação *dual fuel*. Para o uso com biogás, foi observada uma redução de até 52%, enquanto que o uso de

biometano levou a emissões de particulado 60% menores. Exceção foram os resultados para HVO e syngas, que levaram a um comportamento atípico que se deveu possivelmente à característica transiente e à dificuldade de leitura de opacidade por meio do opacímetro utilizado, a despeito da repetição dos testes.

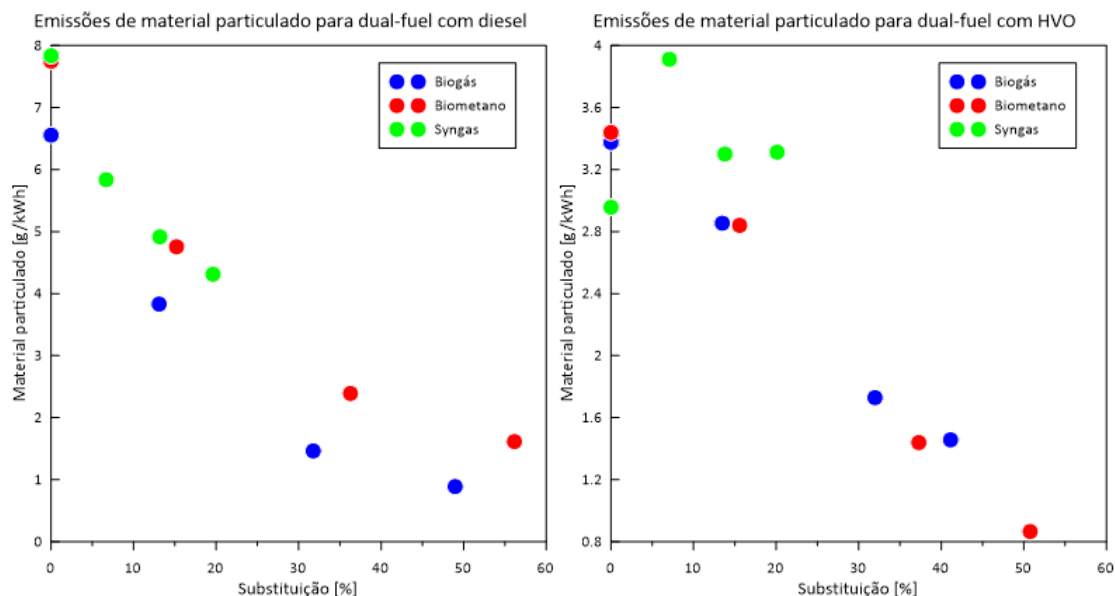


Figura 41: emissões específicas de material particulado nos modos *single* e *dual fuel* para diesel e HVO.

## 6.6 Eficiência da combustão

A eficiência de combustão para os modos *single* e *dual fuel* com diesel é apresentada pela Figura 42. Como é possível observar, existe uma tendência de redução da eficiência de combustão à medida que a taxa de substituição energética aumenta. A despeito das variações nas condições ambientais, este valor se mantém bastante alto para a operação com diesel puro, sempre acima de 96%. Quanto mais combustível secundário é adicionado no pórtico de admissão, menor é a eficiência de combustão, e a velocidade com que este parâmetro decresce varia conforme o combustível utilizado. No caso do syngas, este efeito é mais evidente, atingindo o valor de 95,2% com apenas 19,62% de taxa de substituição. Para o biometano, a eficiência de combustão é reduzida para 94,4% após uma substituição de 56,2%, enquanto que o biogás apresenta o menor impacto sobre este valor, com redução para 96,4% à taxa de substituição de 49,0%. Este efeito está associado às menores emissões de CO

e material particulado observadas para operação com biogás, se comparadas aos valores reportados para *dual fuel* com biometano e syngas.

Para a operação com HVO, uma tendência similar foi observada. Com valores superiores a 98,7% para todos os casos *single fuel*, superando a eficiência de combustão do diesel. O HVO refletiu os já discutidos efeitos de redução de poluentes como CO e material particulado. Assim como notado na operação *dual fuel* com diesel, o syngas apresentou redução mais rápida na qualidade da combustão, seguido pelo biometano e pelo biogás. É importante destacar, todavia, que em todos os casos testados a eficiência de combustão apresentou valores suficientemente altos, indicando que a operação *dual fuel* nas condições estudadas não compromete a combustão de modo a torná-la inviável.

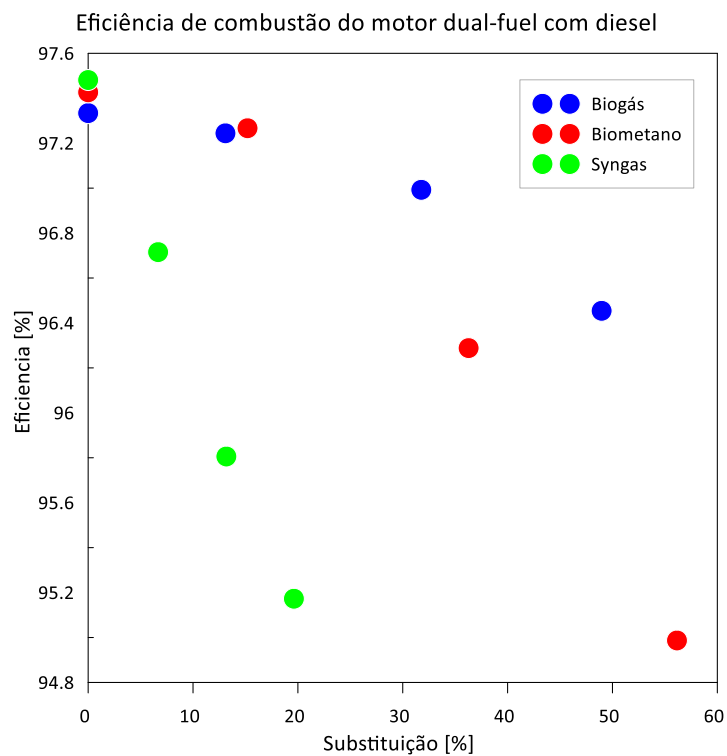


Figura 42: eficiência de combustão do motor diesel operando nos modos *single* e *dual fuel* com diesel.

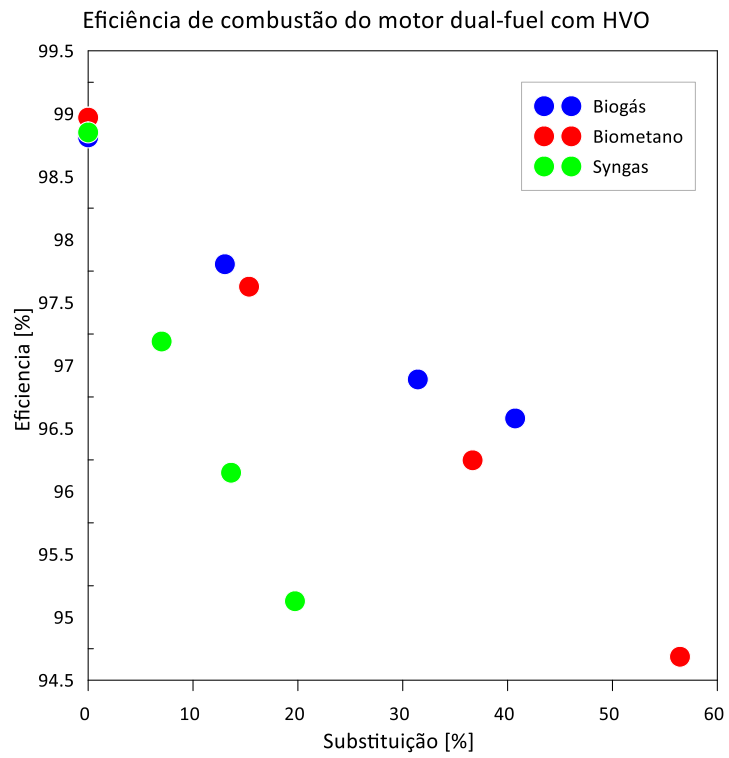


Figura 43: eficiência de combustão do motor diesel operando nos modos *single* e *dual fuel* com HVO.

## 7 CONCLUSÕES

A crescente demanda energética e a constante pressão para a redução do uso de fontes fósseis de energia têm incentivado a indústria automotiva a buscar fontes sustentáveis e modos de operação mais eficientes. Em motores diesel, comumente empregados em veículos pesados, máquinas agrícolas e em geradores de energia, o diesel fóssil já vem há anos sendo parcialmente substituído por alquil ésteres, genericamente chamados biodiesel, e recentemente outros combustíveis avançados como o HVO vêm ganhando espaço no cenário global. Ao mesmo tempo, o modo *dual fuel* permite ampliar o potencial de sustentabilidade em motores diesel ao viabilizar o consumo direto de outros combustíveis renováveis, como gases de síntese, biogás e biometano.

Neste contexto, na presente tese foi analisado uso de diferentes combinações de combustíveis em modo *dual fuel*, incluindo dois combustíveis primários (diesel e HVO) e três secundários (syngas, biogás e biometano). Os combustíveis secundários, que podem ser produzidos por rotas sustentáveis, foram introduzidos no pórtico de admissão de um motor Buffalo BFDE 10, de 7.4 kW, modificado para operação *dual fuel* e adequadamente equipado com sensores de pressão, temperatura, fluxo mássico e rotação. Os testes foram realizados a 1.800 rpm e 10 Nm, representando uma condição típica de geração distribuída de energia.

Os dados obtidos em laboratório foram processados e analisados conforme as normas vigentes, resultando em informações acerca da performance, da combustão e das emissões do motor testado. Com tais informações, foi desenvolvido um modelo numérico em ambiente ANSYS FORTE®, a fim de reproduzir os resultados de laboratório e permitir uma análise detalhada do comportamento da combustão. A análise computacional, que aplicou modelos e submodelos de transferência de calor, turbulência, formação de spray e cinética química, fez uso do mecanismo químico desenvolvido por Ren et al. (2017), e foi capaz de produzir resultados coerentes para diesel, HVO e suas combinações *dual fuel*.

Em geral, as combinações testadas estudadas mostraram potencial técnico e ambiental para a substituição parcial ou total de diesel em motores de ignição por compressão. Foi observado o potencial destes combustíveis na substituição parcial do diesel, com potencial redução nas emissões de NO<sub>x</sub> (até 25,8%) e material particulado (até 86%), associado a um pequeno decréscimo nas eficiências térmica (até 12,5%) e de combustão (até 4,2%). No caso da substituição de diesel por HVO, foram observadas melhorias tanto nas emissões (NO<sub>x</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, HC e material particulado) como na eficiência térmica. Por fim, a combinação dos combustíveis gasosos com o HVO levou à mesma tendência observada para o diesel, porém com resultados superiores em termos de eficiência e emissões.

Como sugestões de trabalhos futuros, podem ser realizadas análises similares focadas em outras combinações *dual fuel*, em outros motores, ou em outros modos de combustão, desde que existam dados experimentais disponíveis para validação dos modelos.

#### **Referências:**

A. AMSDEN. **KIVA3V. A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves.** United States: [s. n.], 1997.

AALBORG. **DPC SERIES PRECISION DIGITAL MASS FLOW CONTROLLER.** [S. l.], 2020. Disponível em: [https://www.aalborg.com/index.php/main\\_page/press\\_releases/news\\_id/12](https://www.aalborg.com/index.php/main_page/press_releases/news_id/12). .

ABD, A.A. *et al.* Methane enrichment in biogas mixture using pressure swing adsorption: process fundamental and design parameters. **Materials Today Sustainability**, [s. l.], v. 11–12, p. 100063, 2021.

ABIOVE. **Produção de biodiesel por matéria-prima.** [S. l.: s. n.], 2019.

ABNT. **NBR ISO 8178-1: Motores alternativos de combustão interna - Medição da emissão de gases de exaustão. Parte 1: Medição das emissões de gases e material particulado em banco de ensaio.** [S. l.]: Associação Brasileira de Normas Técnicas, 2012.

AGHEL, Babak *et al.* A review of recent progress in biogas upgrading: With emphasis on carbon capture. **Biomass and Bioenergy**, [s. l.], v. 160, p. 106422, 2022. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0961953422000836>.

AKAL, Dinçer; ÖZTUNA, Semiha; BÜYÜKAKIN, Mustafa Kemalettin. A review of hydrogen usage in internal combustion engines (gasoline-Lpg-diesel) from combustion performance aspect. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 45, n. 60, p. 35257–35268, 2020.

ALI, Abdelmagid E.A. *et al.* A dual-mesh hybrid Reynolds-averaged Navier-Stokes/Large eddy simulation study of the buoyant flow between coaxial cylinders. **Nuclear Engineering and Design**, [s. l.], v. 393, p. 111789, 2022.

ANP. **Resolução ANP N° 42.** 2004. Disponível em: <http://legislacao.anp.gov.br/?path=legislacao-anp/resol-anp/2004/novembro&item=ranp-42--2004>.

ANP. **Resolução ANP N° 50.** 2013. Disponível em: <https://www.legisweb.com.br/legislacao/?id=263587#:~:text=Regulamenta as especificações do óleo,em todo o território nacional>.

ANP. **Resolução ANP N° 831.** 2020. Disponível em: <https://www.in.gov.br/en/web/dou/-/resolucao-anp-n-831-de-7-de-outubro-de-2020-281791734>.

ANP. **Resolução N° 45.** 2012. Disponível em: <https://www.legisweb.com.br/legislacao/?id=248735>.

ANSYS. **ANSYS Forte Theory Manual. Forte 2020 R2.** [S. l.: s. n.], 2020a.

ANSYS. **ANSYS Forte Theory Manual. Forte 2020 R2.** [S. l.: s. n.], 2020b.

ANSYS. **Chemkin-Pro Theory Manual 2020 R2.** [S. l.: s. n.], 2020c.

ANSYS. **Chemkin-Pro Theory Manual 2020 R2.** [S. l.: s. n.], 2020d.

ANSYS INC. **Forte best practices.** Canonsburg: [s. n.], 2022.

BAKAR, R A *et al.* Experimental analysis on the performance, combustion/emission characteristics of a DI diesel engine using hydrogen in *dual*



*fuel* mode. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], 2022. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319922016998>.

BARATTA, Mirko *et al.* CFD modelling of natural gas combustion in IC engines under different EGR dilution and H<sub>2</sub>-doping conditions. **Transportation Engineering**, [s. l.], v. 2, p. 100018, 2020.

BELAL, Tarek M.; MARZOUK, El Sayed M.; OSMAN, Mohsen M. Investigating Diesel Engine Performance and Emissions Using CFD. **Energy and Power Engineering**, [s. l.], v. 05, n. 02, p. 171–180, 2013.

BEZERGIANNI, Stella; KALOGIANNI, Aggeliki; VASALOS, Iacovos A. Hydrocracking of vacuum gas oil-vegetable oil mixtures for biofuels production. **Bioresource Technology**, [s. l.], v. 100, n. 12, p. 3036–3042, 2009. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.biortech.2009.01.018>.

BORA, Bhaskor J *et al.* Improving combustion and emission characteristics of a biogas/biodiesel-powered dual-fuel diesel engine through trade-off analysis of operation parameters using response surface methodology. **Sustainable Energy Technologies and Assessments**, [s. l.], v. 53, p. 102455, 2022.

BORTEL, Ivan; VÁVRA, Jiří; TAKÁTS, Michal. Effect of HVO fuel mixtures on emissions and performance of a passenger car size diesel engine. **Renewable Energy**, [s. l.], v. 140, p. 680–691, 2019.

BREEZE, Paul. Chapter 5 - Diesel Engines. *In*: PISTON ENGINE-BASED POWER PLANTS. [S. l.: s. n.], 2018. p. 47–57.

CALBRY-MUZYKA, Adelaide *et al.* Biogas composition from agricultural sources and organic fraction of municipal solid waste. **Renewable Energy**, [s. l.], v. 181, p. 1000–1007, 2022.

CATON, Jerald A. **An introduction to thermodynamic cycle simulations for internal combustion engines**. West Sussex: Wiley, 2016.

CATON, Jerald A. The Thermodynamics of Internal Combustion Engines: Examples of Insights. **Inventions**, [s. l.], v. 3, n. 2, 2018. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2411-5134/3/2/33>.

CORONADO, Christian Rodriguez; YOSHIOKA, Juliana Tiyoko; SILVEIRA, José Luz. Electricity, hot water and cold water production from biomass. Energetic and economical analysis of the compact system of cogeneration run with woodgas from a small downdraft gasifier. **Renewable Energy**, [s. l.], v. 36, n. 6, p. 1861–1868, 2011.

CURRAN, Henry J. Developing detailed chemical kinetic mechanisms for fuel combustion. **Proceedings of the Combustion Institute**, [s. l.], v. 37, n. 1, p. 57–81, 2019. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1540748918302372>.

DA COSTA, Roberto Berlim Rodrigues. **Estudo experimental de um motor de ignição por compressão utilizando diesel renovável da cana-de-açúcar (farnesano) e biodiesel de óleo residual de fritura**. 2021. - Universidade Federal de Itajubá, [s. l.], 2021.

DA COSTA, Roberto Berlim Rodrigues *et al.* Experimental assessment of power generation using a compression ignition engine fueled by farnesane – A renewable diesel from sugarcane. **Energy**, [s. l.], v. 233, 2021.

DA COSTA, Roberto Berlim Rodrigues *et al.* Experimental assessment of renewable diesel fuels (HVO/Farnesane) and bioethanol on dual-fuel mode. **Energy Conversion and Management**, [s. l.], v. 258, p. 115554, 2022a. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890422003508>.

DA COSTA, Roberto Berlim Rodrigues *et al.* Experimental assessment of renewable diesel fuels (HVO/Farnesane) and bioethanol on dual-fuel mode. **Energy Conversion and Management**, [s. l.], v. 258, p. 115554, 2022b.

DAI, Qiang; LASTOSKIE, Christian M. Life Cycle Assessment of Natural Gas-Powered Personal Mobility Options. **Energy & Fuels**, [s. l.], v. 28, n. 9, p. 5988–5997, 2014.

DARZI, Mahdi *et al.* Low pressure direct injection strategies effect on a small SI natural gas two-stroke engine's energy distribution and emissions. **Applied Energy**, [s. l.], v. 230, n. September, p. 1585–1602, 2018.

DE OLIVEIRA, Ricardo. **Volkswagen contra hidrogênio: “não deve acabar nos carros”**. [S. l.], 2021.

DE SOUZA, T. A. Z. *et al.* Biodiesel in South American countries : A review on policies , stages of development and imminent competition with hydrotreated vegetable oil. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s. l.], v. 153, n. September 2021, p. 111755, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111755>.

DE SOUZA, T.A.Z. *et al.* Biodiesel in South American countries: A review on policies, stages of development and imminent competition with hydrotreated vegetable oil. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s. l.], v. 153, p. 111755, 2022.

DE SOUZA, T. A. Z. *et al.* CFD analysis of different biogas upgrading levels for dual-fuel operation in diesel engines. *In:* , 2023. **16th International Conference on Engines & Vehicles**. [S. l.]: SAE International, 2023.

DE SOUZA, T. A. Z. *et al.* Economic assessment of hydrogen and electricity cogeneration through steam reforming-SOFC system in the Brazilian biodiesel industry. **Journal of Cleaner Production**, [s. l.], v. 279, p. 123814, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.123814>.

DEB, Madhujit *et al.* An experimental investigation of performance-emission trade off characteristics of a CI engine using hydrogen as *dual fuel*. **Energy**, [s. l.], v. 85, p. 569–585, 2015. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2015.03.108>.

DEPRÉDURAND, V; CASTANET, G; LEMOINE, F. Heat and mass transfer in evaporating droplets in interaction: Influence of the fuel. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, [s. l.], v. 53, n. 17, p. 3495–3502, 2010. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931010001948>.

DHYANI, Vipin; SUBRAMANIAN, K. A. Development of online control system for elimination of backfire in a hydrogen fuelled spark ignition engine. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], n. xxxx, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.08.148>.

DIESEL, Rudolf. **Method of and apparatus for converting heat into work.** Concessão: 1895.

DIXIT, Shivanshu *et al.* CFD analysis of biodiesel blends and combustion using Ansys Fluent. **Materials Today: Proceedings**, [s. l.], n. xxxx, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2019.12.362>.

DONG, Yabin. **Reactivity controlled compression ignition (RCCI) combustion using methanol and diesel in a *single* cylinder research engine.** 2018. - Aalto University, [s. l.], 2018.

ECB GROUP. **Omega Green.** [S. l.], 2021. Disponível em: [ecbgroup.com.br/pt/grupo/ecb-paraguay/omega-green](http://ecbgroup.com.br/pt/grupo/ecb-paraguay/omega-green). .

EGOLFOPOULOS, F N *et al.* Advances and challenges in laminar flame experiments and implications for combustion chemistry. **Progress in Energy and Combustion Science**, [s. l.], v. 43, p. 36–67, 2014. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360128514000252>.

EPE. **Balanco Energético Nacional 2023.** Brasília: [s. n.], 2023a.

EPE. **Infraestrutura de Gasodutos de Transporte no Brasil.** [S. l.], 2023b. Disponível em: <https://www.epe.gov.br/pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/mapa-da-infraestrutura-de-gasodutos-de-transporte-no-brasil>. Acesso em: 29 jun. 2023.

EVARISTO, Rafael B.W. *et al.* Multiparameter-analysis of CO<sub>2</sub>/Steam-enhanced gasification and pyrolysis for syngas and biochar production from low-cost feedstock. **Energy Conversion and Management: X**, [s. l.], v. 12, p. 100138, 2021.

FANG, Xiaoyuan *et al.* Development of a skeletal surrogate mechanism for emulating combustion characteristics of diesel from direct coal liquefaction. **Combustion and Flame**, [s. l.], v. 218, p. 84–97, 2020.

FRASSOLDATI, Alessio *et al.* Reduced kinetic mechanisms of diesel fuel surrogate for engine CFD simulations. **Combustion and Flame**, [s. l.], v. 162, n. 10, p. 3991–4007, 2015.

GASMIG. **Gás natural composição.** [S. l.], 2019. Disponível em: <http://www.gasmig.com.br/GasNatural/Paginas/Composicao.aspx>. Acesso em: 1 jun. 2019.

GARCIA-OLIVER *et al.* A Numerical Approach for the Analysis of Hydrotreated Vegetable Oil and Dimethoxy Methane Blends as Low-Carbon Alternative Fuel in Compression Ignition Engines. **WCX SAE World Congress Experience.** [S. l.]: SAE International, 2017.

GOVERNO DO BRASIL. **Governo oficializa ampliação da mistura de biodiesel no diesel vendido no país.** [S. l.], 2023.

GUBAN, Dorottya *et al.* Assessment of sustainable high temperature hydrogen production technologies. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 45, n. 49, p. 26156–26165, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.08.145>.

GUPTA, Aman; SHARMA, Shubham; NARAYAN, Sunny. **Combustion engines: an introduction to their design, performance, and selection.** [S. l.]: Scrivener Publishing, 2016a-. ISSN 0036-8733.v. 59

GUPTA, Aman; SHARMA, Shubham; NARAYAN, Sunny. **Combustion engines: an introduction to their design, performance, and selection.** [S. l.]: Scrivener Publishing, 2016b-. ISSN 0036-8733.v. 59

HALL, Carrie; KASSA, Mateos. Advances in combustion control for natural gas–diesel *dual fuel* compression ignition engines in automotive applications: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s. l.], v. 148, n. August 2020, p. 111291, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111291>.

HAN, Z.; REITZ, R. D. Turbulence Modeling of Internal Combustion Engines Using RNG  $\kappa$ - $\epsilon$  Models. **Combustion Science and Technology**, [s. l.], v. 106, n. 4–6, p. 267–295, 1995.

HARLOW, F.H.; NAKAYAMA, P.I. **TRANSPORT OF TURBULENCE ENERGY DECAY RATE.** U.S. Atomic Energy Commission: [s. n.], 1968.

HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engine Fundamentals**. 2. ed. [S. l.]: McGraw Hill Education, 2018a.

HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engine Fundamentals**. 2. ed. [S. l.]: McGraw Hill Education, 2018b.

HEYWOOD, J. B. Not dead yet: the resilient ICE looks to 2050. **Automotive Engineering, SAE Internation**, [s. l.], 2018c.

HIROYASU, Hiroyuki; ARAI, Masataka; TABATA, M. Empirical Equations for the Sauter Mean Diameter of a Diesel Spray. *In:* , 1989. **SAE International Congress and Exposition**. [S. l.]: SAE International, 1989. Disponível em: <https://doi.org/10.4271/890464>.

HIROYASU, Hiroyuki; KADOTA, T.; ARAI, Masataka. Combustion Modeling in Reciprocating Engines. *In:* , 1980, New York, London. **Symp at GM-Research-Laboratories 1978**. New York, London: Plenum Press, 1980. p. 349–405.

HOEKMAN, S. Kent *et al.* Review of biodiesel composition, properties, and specifications. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s. l.], v. 16, n. 1, p. 143–169, 2012. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.rser.2011.07.143>.

INDRAJUANA, Armando *et al.* Towards Model-Based Control of RCCI-CDF Mode-Switching in *Dual fuel* Engines. **SAE Technical Paper**, [s. l.], v. 2018-01–02, p. 13, 2018a.

INDRAJUANA, Armando *et al.* Towards Model-Based Control of RCCI-CDF Mode-Switching in *Dual fuel* Engines. **SAE Technical Paper**, [s. l.], v. 2018-01–02, p. 13, 2018b.

JAROONJITSATHIAN, Somnuek *et al.* Effects of GTL and HVO Blended Fuels on Combustion and Exhaust Emissions of a Common-Rail DI Diesel Technology. *In:* , 2014. **SAE 2014 International Powertrain, Fuels & Lubricants Meeting**. [S. l.: s. n.], 2014.

JIN, Chao; ZHENG, Zunqing. A review on homogeneous charge compression ignition and low temperature combustion by optical diagnostics. **Journal of Chemistry**, [s. l.], v. 2015, 2015.

KAMARUDDIN, Tengku Nordayana Akma Tuan; WAHID, Mazlan Abdul; SIES, Mohsin Mohd. Review of homogeneous charge compression ignition (HCCI) combustion engines and exhaust gas recirculation (EGR) effects on HCCI. **AIP Conference Proceedings**, [s. l.], v. 1440, n. Imat 2011, p. 1099–1109, 2012.

KARAVALAKIS, George *et al.* Emissions and Fuel Economy Evaluation from Two Current Technology Heavy-Duty Trucks Operated on HVO and FAME Blends. **SAE International Journal of Fuels and Lubricants**, [s. l.], v. 9, n. 1, p. 177–190, 2016.

KASHDAN, J. T.; DOCQUIER, N.; BRUNEAUX, G. Mixture preparation and combustion via LIEF and LIF of combustion radicals in a direct-injection HCCI diesel engine. **SAE Paper**, [s. l.], v. 2004-01–29, 2004.

KASSA, Mateos; HALL, Carrie. Dual-Fuel Combustion. *In: THE FUTURE OF INTERNAL COMBUSTION ENGINES*. [S. l.: s. n.], 2018. p. 1–17.

KIM, Duckhan *et al.* Engine performance and emission characteristics of hydrotreated vegetable oil in light duty diesel engines. **Fuel**, [s. l.], v. 125, p. 36–43, 2014.

KONG, Song-Chang *et al.* Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD. *In:* , 2001. **Anais [...]**. [S. l.: s. n.], 2001.

KONG, Dehong; ECKHOFF, Rolf K.; ALFERT, Franz. Auto-ignition of CH<sub>4</sub>air, C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>air, CH<sub>4</sub>/C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>/air and CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>/air using a 11 ignition bomb. **Journal of Hazardous Materials**, [s. l.], v. 40, n. 1, p. 69–84, 1995.

KUMANO, Kengo; YAMASAKI, Yudai; IIDA, Norimasa. An Investigation of the Effect of Charge Inhomogeneity on the Ignition and Combustion Processes in a HCCI Engine Using Chemiluminescence Imaging. **Journal of Thermal Science and Technology**, [s. l.], v. 2, n. 2, p. 200–211, 2007.

KUMAR, Chandra Bhushan; LATA, D B; MAHTO, Dhaneshwar. Analysis of ignition delay by taking Di-tertiary-butyl peroxide as an additive in a *dual fuel* diesel engine using hydrogen as a secondary fuel. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 45, n. 29, p. 14806–14820, 2020. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319920312477>.

LI, Menghan *et al.* A comprehensive review of pilot ignited high pressure direct injection natural gas engines: Factors affecting combustion, emissions and performance. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s. l.], v. 119, n. 68, p. 109653, 2020.

LIU, Jie *et al.* Optimization of a diesel/natural gas *dual fuel* engine under different diesel substitution ratios. **Fuel**, [s. l.], v. 305, p. 121522, 2021.

LIU, Yue *et al.* Recent developments of hydrogen production from sewage sludge by biological and thermochemical process. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 44, n. 36, p. 19676–19697, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.06.044>.

LORENZI, G. *et al.* Use of waste vegetable oil for hydrotreated vegetable oil production with high-temperature electrolysis as hydrogen source. **Fuel**, [s. l.], v. 278, p. 117991, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2019.01.465>.

MAGHANAKI, M. Mohammadi *et al.* Potential of biogas production in Iran. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s. l.], v. 28, p. 702–714, 2013.

MAHMOODI, Reza *et al.* Effect of reformed biogas as a low reactivity fuel on performance and emissions of a RCCI engine with reformed biogas/diesel dual-fuel combustion. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 46, n. 30, p. 16494–16512, 2021. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360319920336235>.

MAROTEAUX, Fadila. Development of a two-part n-heptane oxidation mechanism for two stage combustion process in internal combustion engines. **Combustion and Flame**, [s. l.], v. 186, p. 1–16, 2017.

MAROTEAUX, Fadila; VAGLIECO, Bianca Maria; MANCARUSO, Ezio. N-heptane ignition delay time with temperature criterion for HCCI combustion. **Fuel**, [s. l.], v. 225, p. 483–489, 2018.

MCCORMICK, Robert L.; ALLEMAN, Teresa L.; YANOWITZ, Janet. Exhaust Emissions. *In*: THE BIODIESEL HANDBOOK: SECOND EDITION. [S. l.: s. n.], 2010. p. 253–298.



MENAA, A. *et al.* CFD analysis of hydrogen injection pressure and valve profile law effects on backfire and pre-ignition phenomena in hydrogen-diesel *dual fuel* engine. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 44, n. 18, p. 9408–9422, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.02.123>.

MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA. **Sobre o Programa Nacional de Produção e uso do Biodiesel - PNPB**. [S. l.], 2020. Disponível em: <http://www.mme.gov.br/web/guest/secretarias/petroleo-gas-natural-e-biocombustiveis/acoes-e-programas/programas/biodiesel/sobre-o-pnpb>. .

MOLLENHAUER, Klaus; TSCHOEKE, Helmut. **Handbook of Diesel engines**. [S. l.]: Springer, 2010.

MÜLLER-CASSERES, Eduardo *et al.* Production of alternative marine fuels in Brazil: An integrated assessment perspective. **Energy**, [s. l.], v. 219, p. 119444, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.119444>.

MULU, Elshaday *et al.* Biogas upgrade using modified natural clay. **Energy Conversion and Management: X**, [s. l.], v. 12, p. 100134, 2021.

NAVALE, S. J.; KULKARNI, R. R.; THIPSE, S. S. An experimental study on performance, emission and combustion parameters of hydrogen fueled spark ignition engine with the timed manifold injection system. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 42, n. 12, p. 8299–8309, 2017.

OLANREWAJU, Francis Omotola *et al.* Analysis of the effect of syngas substitution of diesel on the Heat Release Rate and combustion behaviour of Diesel-Syngas *dual fuel* engine. **Fuel**, [s. l.], v. 312, p. 122842, 2022. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0016236121027058>.

PECHOUT, Martin *et al.* Comparison of hydrogenated vegetable oil and biodiesel effects on combustion, unregulated and regulated gaseous pollutants and DPF regeneration procedure in a Euro6 car. **Science of the Total Environment**, [s. l.], v. 696, p. 133748, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.133748>.

PETROBRAS. **Concluimos testes para produção de diesel renovável**. [S. l.], 2020. Disponível em: <https://petrobras.com.br/fatos-e-dados/concluimos-testes-para-producao-de-diesel-renovavel.htm>. Acesso em: 26 out. 2020.

PHAM, Quangkhai *et al.* Review of dual-fuel combustion in the compression-ignition engine: Spray, combustion, and emission. **Energy**, [s. l.], v. 250, p. 123778, 2022. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360544222006818>.

PINTO, G.M. *et al.* Experimental investigation of performance and emissions of a CI engine operating with HVO and farnesane in dual-fuel mode with natural gas and biogas. **Energy**, [s. l.], v. 277, p. 127648, 2023a.

PINTO, G.M. *et al.* Experimental investigation of performance and emissions of a CI engine operating with HVO and farnesane in dual-fuel mode with natural gas and biogas. **Energy**, [s. l.], v. 277, p. 127648, 2023b. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360544223010423>.

PRESIDÊNCIA DA REPÚBLICA. **DECRETO DE 2 DE JULHO DE 2003**. 2003. Disponível em: [http://www.planalto.gov.br/ccivil\\_03/DNN/2003/Dnn9920.htm](http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/DNN/2003/Dnn9920.htm).

PRESIDÊNCIA DA REPÚBLICA. **Decreto nº 76.593, de 14 de Novembro de 1975**. 1975. Disponível em: <https://www2.camara.leg.br/legin/fed/decret/1970-1979/decreto-76593-14-novembro-1975-425253-publicacaooriginal-1-pe.html>.

RABELLO DE CASTRO, R.; BREQUIGNY, P.; MOUNAÏM-ROUSSELLE, C. A multiparameter investigation of syngas/diesel dual-fuel engine performance and emissions with various syngas compositions. **Fuel**, [s. l.], v. 318, p. 123736, 2022. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0016236122005993>.

RAPP, Bastian E. Chapter 9 - Fluids. *In*: RAPP, Bastian E (org.). **Microfluidics: Modelling, Mechanics and Mathematics**. Oxford: Elsevier, 2017. (Micro and Nano Technologies). p. 243–263. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9781455731411500095>.

REN, Shuojin *et al.* A multi-component wide distillation fuel (covering gasoline, jet fuel and diesel fuel) mechanism for combustion and PAH prediction. **Fuel**, [s. l.], v. 208, p. 447–468, 2017. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0016236117308633>.

RIMKUS, Alfredas; MELAIKA, Mindaugas; MATIJOŠIUS, Jonas. Efficient and Ecological Indicators of CI Engine Fuelled with Different Diesel and LPG Mixtures. **Procedia Engineering**, [s. l.], v. 187, p. 504–512, 2017.

RIMKUS, Alfredas; STRAVINSKAS, Saulius; MATIJOŠIUS, Jonas. 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 (Switzerland)**, [s. l.], v. 10, n. 1, 2020.

ROCHA, D. H.D. *et al.* Exergoenvironmental analysis of hydrogen production through glycerol steam reforming. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 46, n. 1, p. 1385–1402, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.10.012>.

SARAVANAN, N.; NAGARAJAN, G.; NARAYANASAMY, S. An experimental investigation on DI diesel engine with hydrogen fuel. **Renewable Energy**, [s. l.], v. 33, n. 3, p. 415–421, 2008.

SAZHIN, S.S. *et al.* A multi-dimensional quasi-discrete model for the analysis of Diesel fuel droplet heating and evaporation. **Fuel**, [s. l.], v. 129, p. 238–266, 2014.

SHARMA, Prabhakar; SAHOO, Bibhuti B. An ANFIS-RSM based modeling and multi-objective optimization of syngas powered dual-fuel engine. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 47, n. 44, p. 19298–19318, 2022. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0360319922016068>.

SHEU, J. K. *et al.* InGaN-based epitaxial films as photoelectrodes for hydrogen generation through water photoelectrolysis and CO<sub>2</sub> reduction to formic acid. **Solar Energy Materials and Solar Cells**, [s. l.], v. 166, n. March, p. 86–90, 2017. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.solmat.2017.03.014>.

SINGER, A. *et al.* Aging studies of biodiesel and HVO and their testing as neat fuel and blends for exhaust emissions in heavy-duty engines and passenger cars. **Fuel**, [s. l.], v. 153, n. 2015, p. 595–603, 2015. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2015.03.050>.

SINGH, Prakash; KALAMDHAD, Ajay S. Assessment of agricultural residue-based electricity production from biogas in India: Resource-environment-economic analysis. **Sustainable Energy Technologies and Assessments**, [s. l.], v. 54, p. 102843, 2022.

SOAM, Shveta; HILLMAN, Karl. Factors influencing the environmental sustainability and growth of hydrotreated vegetable oil (HVO) in Sweden.

**Bioresource Technology Reports**, [s. l.], v. 7, p. 100244, 2019. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2589014X19301343>.

SOTELO-BOYAS, Rogelio; TREJO-ZARRAGA, Fernando; JESUS HERNANDEZ-LOYO, Felipe de. Hydroconversion of Triglycerides into Green Liquid Fuels. **Hydrogenation**, [s. l.], 2012.

TIMOFEEVA, S.S. *et al.* Steam gasification of digestate after anaerobic digestion and dark fermentation of lignocellulosic biomass to produce syngas with high hydrogen content. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 48, n. 21, p. 7559–7568, 2023.

UCSD. **The San Diego Mechanism**. [S. l.], 2016. Disponível em: <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>. Acesso em: 3 fev. 2022.

VALCO, Daniel J. *et al.* Ignition characterization of F-76 and algae-derived HRD-76 at elevated temperatures and pressures. **Combustion and Flame**, [s. l.], v. 181, p. 157–163, 2017.

VOJTISEK-LOM, Michal *et al.* Blends of butanol and hydrotreated vegetable oils as drop-in replacement for diesel engines: Effects on combustion and emissions. **Fuel**, [s. l.], v. 197, p. 407–421, 2017.

WANG, Bo *et al.* Numerical study on the effects of homogeneous reactions on the composition distributions of syngas in radiant syngas cooler. **Applied Thermal Engineering**, [s. l.], v. 210, p. 118307, 2022.

WANG, Hao; QIN, Guoliang; LI, Changan. A modified Arrhenius constitutive model of 2219-O aluminum alloy based on hot compression with simulation verification. **Journal of Materials Research and Technology**, [s. l.], v. 19, p. 3302–3320, 2022.

WARNATZ, Jürgen. The structure of laminar alkane-, alkene-, and acetylene flames. **Symposium (International) on Combustion**, [s. l.], v. 18, n. 1, p. 369–384, 1981. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0082078481800422>.

WEINER, Andre *et al.* Experimental and numerical investigation of reactive species transport around a small rising bubble. **Chemical Engineering Science: X**, [s. l.], v. 1, p. 100007, 2019. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590140019300140>.

WEXLER, A. Vapor pressure formulation for water in range 0 to 100 C. A revision. **Journal of Research of the National Bureau of Standards Section A: Physics and Chemistry**, [s. l.], v. 80A, n. 5–6, p. 775, 1976.

WIDAYAT; WIBOWO, Agam Duma Kalista; HADIYANTO. Study on production process of biodiesel from rubber seed (*hevea brasiliensis*) by in situ (trans)esterification method with acid catalyst. **Energy Procedia**, [s. l.], v. 32, p. 64–73, 2013. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.egypro.2013.05.009>.

XIONG, Qing-an *et al.* Fundamental study of the integrated process of heavy oil pyrolysis and coke gasification. Part I: Effect of CO and H<sub>2</sub> in syngas atmosphere on heavy oil pyrolysis. **Fuel**, [s. l.], v. 324, p. 124650, 2022.

XU, Chunbao (Charles) *et al.* 1.19 Biomass Energy. *In*: COMPREHENSIVE ENERGY SYSTEMS. [S. l.]: Elsevier, 2018. p. 770–794. Disponível em: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128095973001218>.

YANG, Xiaolong; LIAO, Cheng; LIU, Jingping. Harmonic analysis and optimization of the intake system of a gasoline engine using GT-power. **Energy Procedia**, [s. l.], v. 14, p. 756–762, 2012. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1876610211044274>.

YE, Yixiang *et al.* Numerical study of the effect of injection timing on the knock combustion in a direct-injection hydrogen engine. **International Journal of Hydrogen Energy**, [s. l.], v. 45, n. 51, p. 27904–27919, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.07.117>.

YUE, Yan *et al.* Characteristics and potential values of bio-oil, syngas and biochar derived from *Salsola collina* Pall. in a fixed bed slow pyrolysis system. **Bioresource Technology**, [s. l.], v. 220, p. 378–383, 2016.

ZEHNI, Alborz; SARAY, Rahim Khoshbakhti. Comparison of late PCCI combustion, performance and emissions of diesel engine for B20 and B100 fuels

by KIVA-CHEMKIN coupling. **Renewable Energy**, [s. l.], v. 122, p. 118–130, 2018. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960148118300466>.

ZHANG, Yaoyuan *et al.* Potential of EGR and intake heating for load extension using gasoline-ethanol blends as low reactivity fuel in an intelligent charge compression ignition engine. **Fuel**, [s. l.], v. 314, p. 122785, 2022. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S001623612102648X>.

ZHU, Zhaojun; LI, Yikai; SHI, Cheng. Effect of natural gas energy fractions on combustion performance and emission characteristics in an optical CI engine fueled with natural gas/diesel dual-fuel. **Fuel**, [s. l.], v. 307, p. 121842, 2022.