

LYDIA LOPES CORREIA DA SILVA

**MODELAGEM DA FORMAÇÃO E EMISSÃO DE
HIDROCARBONETOS EM MOTORES A GÁS**

**Tese apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do
título de Doutor em Engenharia.**

São Paulo

1999

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITÉCNICA

LYDIA LOPES CORREIA DA SILVA

**MODELAGEM DA FORMAÇÃO E EMISSÃO DE
HIDROCARBONETOS EM MOTORES A GÁS**

**Tese apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de
São Paulo para obtenção do
título de Doutor em Engenharia.**

**Área de Concentração :
Engenharia Mecânica**

**Orientador :
Francisco Emilio Baccaro Nigro**

São Paulo

1999

Ao Antonio, meu companheiro de caminhada, e
às razões de nossas vidas, Claudia e Leonardo.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Cynira e Claudionor, pelos preciosos ensinamentos de vida.

Ao orientador seguro e presente e , acima de tudo, sempre professor, Prof. Dr. Francisco Emílio Baccaro Nigro.

Ao amigos e colegas do IPT, pelo estímulo e colaboração.

À SCTDE – Secretaria de Ciência, Tecnologia e Desenvolvimento Econômico do Estado de São Paulo, à FAPESP – Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo e à Mercedes Benz do Brasil, pelo apoio financeiro e material , possibilitando a execução deste trabalho.

ERRATA

Na página 62 substituir a eq. (5.1) por:
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{h_y} \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot h_y \cdot u) + \frac{1}{h_y} \cdot \frac{\partial}{\partial y} (\rho \cdot v) = 0$$

e a eq. (5.2) por:
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot u) + \frac{1}{h_y} \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot h_y \cdot u \cdot u) + \frac{1}{h_y} \cdot \frac{\partial}{\partial y} (\rho \cdot v \cdot u) = \frac{1}{h_y} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{h_y} \cdot \mu \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right)$$

Acrescentar após a eq. (5.2) : "onde x é uma coordenada de métrica unitária na direção ao longo da camada limite, que neste caso coincide muito aproximadamente com a direção axial do cilindro, e y é uma coordenada transversal à camada limite (ortogonal a x), e cuja métrica fixa no tempo é h_y ."

Na penúltima linha da página 62, onde se lê: " x, η, t , sendo $\eta = y/y_E$ ", leia-se :

" ξ, η, τ , sendo $dx = d\xi$; $dy \cdot h_y = h_E \cdot d\eta + \frac{\partial h_E}{\partial \tau} \cdot d\tau$; $dt = d\tau$ (5.3) ,

onde η é deformável no tempo e tem a mesma direção de y ."

No início da página 63, onde se lê: "Como $0 \leq \eta \leq 1$... (5.3).", leia-se: "Uma grandeza escalar $\theta(x, y, t)$ pode ser representada por $\theta(\xi, \eta, \tau)$ no sistema deformável de

coordenadas. Portanto:
$$d\theta = \frac{\partial \theta}{\partial x} \cdot dx + \frac{\partial \theta}{\partial y} \cdot dy + \frac{\partial \theta}{\partial t} \cdot dt = \frac{\partial \theta}{\partial \xi} \cdot d\xi + \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \cdot d\eta + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} \cdot d\tau$$

e substituindo as diferenciais da eq. (5.3), obtém-se:
$$\frac{\partial \theta}{\partial x} = \frac{\partial \theta}{\partial \xi} ,$$

$\frac{1}{h_y} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{1}{y_E} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \eta}$ e $\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial \tau} - \frac{1}{y_E} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial y_E}{\partial \tau}$; fazendo $\theta = \rho$ para substituição na

eq. (5.1) e $\theta = \rho \cdot u$ para substituição na eq. (5.2), obtém-se as equações de continuidade e quantidade de movimento no novo sistema de coordenadas."

Na eq. (5.4) da página 63, substituir " $\frac{D y_E}{Dt}$ " por " $\frac{\partial y_E}{\partial t}$ " .

Na eq. (5.8) da página 64, substituir " $\frac{\partial}{\partial x} (\rho u u)$ " por " $\frac{1}{y_E} \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot y_E u u)$ " .

Na eq. (5.55) da página 85, substituir " $\int_0^y \frac{\partial \rho}{\partial y} \cdot \frac{1}{M} dy$ " por " $\frac{\partial}{\partial y} \cdot \int_0^y \frac{\rho}{M} dy$ " .

Alterar as legendas da figura 6.1 da página 92 para: "Velocidade instantânea do pistão em relação ao cilindro e velocidade média de saída dos hidrocarbonetos das frestas, em relação ao pistão." ; da figura 6.7 da página 102 para : "Variação da espessura da camada limite do jato em função da posição angular do virabrequim para cada seção do cilindro; o início de cada curva indica a posição do pistão na qual a referida seção é descoberta, expondo a massa de hidrocarbonetos que deixa a fresta." ; da figuras 6.13 e 6.14 da página 109 para: "Massa de hidrocarbonetos que deixa as frestas, adicionada da massa transportada para cada seção (m HC frestas); massa não queimada que permanece no cilindro(m HC cilindro); temperatura dos gases no cilindro (T cilindro), para cada seção, em função da posição angular de virabrequim correspondente ao instante no qual a seção é descoberta," , sendo que em ambas as figuras ficam inalteradas as respectivas sub-legendas:"gás A ...de carga."

Na página 111, após o último parágrafo, acrescentar: "A comparação da massa total de CH₄ que retorna ao cilindro, proveniente das frestas, para as quatro diferentes condições de operação indica pouca variação entre as condições de plena carga para o gás A. Já a operação a 50% de carga implica em massa total de CH₄ de cerca de 60% daquela obtida com o motor à plena carga, valor coerente com a variação de densidade da carga. Na operação com o gás B, o valor obtido (0,68 mg de CH₄ /ciclo) parece adequado, uma vez que o teor de metano no gás é de cerca de 37% em massa. Quando se considera a fração global de CH₄ que sobrevive à pós oxidação (CH₄ não queimado no cilindro / CH₄ que retorna ao cilindro), nota-se que para o gás A aproximadamente 12% do metano escapa à pós combustão, na condição de plena carga, enquanto que a 50% de carga esse valor sobe para 29%. Para o gás B, em virtude dos maiores valores de temperatura e pressão no cilindro, apenas 7% sobrevive à pós oxidação."

Ao final do primeiro parágrafo da página 112, acrescentar: "Há que se mencionar que os valores medidos referentes às emissões de metano para o gás B podem ter sido afetados pela oxidação parcial do etano, aspecto não considerado no modelo utilizado." e na tabela 6.1 dessa mesma página acrescentar, abaixo da linha "SIMULAÇÃO", a seguinte linha:

CH ₄ total, proveniente das frestas, que retorna ao cilindro (mg/ciclo)	1,47	0,88	1,44	0,68
--	------	------	------	------

e substituir o vocábulo "injeção" pela expressão "transporte axial".

Na página 114, após o segundo parágrafo, acrescentar: "Essa abordagem permitiu uma compreensão mais profunda dos processos de formação e emissão de hidrocarbonetos em motores a gás, que efetivamente envolvem transporte convectivo axial. Modelos recentes encontrados na literatura, que se propõem à mesma finalidade do presente trabalho, desprezam o efeito deste modo de transporte, por considerá-lo de menor importância frente ao transporte difusivo na direção normal à parede do cilindro.

Os resultados obtidos a partir do desenvolvimento espacial da camada limite de hidrocarbonetos emergentes das frestas, permitiram um exame mais detalhado da evolução do comportamento dessa camada limite, indicando que, ao se permitir expansão bidimensional da mistura das frestas, ocorrem variações do sentido do escoamento médio desta mistura, em relação ao cilindro, provocando mudanças na espessura da camada limite. Observou-se um acúmulo de hidrocarbonetos nas regiões próximas ao PMI (final do curso de expansão), que se reflete diretamente na elevação do nível de emissão desse poluente, o que ajudaria a explicar as diferenças observadas entre resultados experimentais e modelos até então desenvolvidos.

Embora os poucos dados experimentais disponíveis tenham dificultado a avaliação quantitativa, em toda sua extensão, da contribuição do enfoque aqui apresentado, não restou dúvida a respeito da importância de se considerar o transporte convectivo axial, no estudo da difusão e reação dos hidrocarbonetos em motores."

No item intitulado "RESUMO", antes do início da numeração de páginas, após o quarto parágrafo acrescentar: "A introdução de uma abordagem que considera e simula numericamente o desenvolvimento de uma camada limite de gases não queimados junto às paredes do cilindro, possibilitou um exame detalhado da evolução dessa camada, mostrando alterações significativas de sua espessura, tanto no espaço, quanto no tempo, e demonstrando a importância do transporte de massa de hidrocarbonetos não queimados na direção axial do cilindro.". No quinto parágrafo onde se lê: "que emergem das frestas", leia-se: "contidos na camada limite, no qual o transporte axial de massa entre as seções do cilindro foi simulado através de injeção ou retirada de massa pelas paredes". E após o sexto parágrafo acrescentar: "Comparação dos resultados simulados, considerando ou não o transporte de massa na direção axial do cilindro, mostrou que esse transporte pode ser responsável por triplicar a massa de hidrocarbonetos que escapa à pós oxidação dentro do cilindro."

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SÍMBOLOS

RESUMO

“ABSTRACT”

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. OBJETIVOS.....	3
3. REVISÃO E ANÁLISE BIBLIOGRÁFICA.....	5
3.1 Mecanismos de Formação de Compostos Orgânicos - Hidrocarbonetos.....	5
3.2 Formação e Emissão de Hidrocarbonetos em Motores a Gás.....	18
3.3 Emissão de Poluentes e Combustão em Motores a Gás Natural.....	27
3.4 Simulação Termodinâmica do Ciclo de Trabalho em Motores.....	33
3.4.1 Modelagem do processo de combustão.....	33
3.4.2 Transferência de calor em motores.....	38
4. ATIVIDADES EXPERIMENTAIS.....	44
4.1 Preparação dos Ensaios.....	44
4.1.1 Infraestrutura laboratorial.....	44
4.1.2 Preparação das misturas de gases combustíveis.....	46
4.1.3 Preparação de motor a gás natural.....	46

4.2	Ensaio Dinamométricos.....	49
4.2.1	Metodologia de ensaio.....	49
4.2.2	Apresentação e análise dos resultados.....	50
5.	MODELO DA FORMAÇÃO E EMISSÃO DE HIDROCARBONETOS EM MOTORES A GÁS.....	58
5.1	Premissas do Modelo.....	58
5.2	Equacionamento da Camada Limite.....	61
5.2.1	Equacionamento geral da camada limite.....	62
5.2.2	Cálculo numérico da camada limite.....	66
5.2.3	Equacionamento da espessura da camada descarregada pelo pistão.....	71
5.2.4	Vazão mássica de ajuste.....	73
5.3	Modelo de Difusão Turbulenta.....	73
5.4	Mecanismo de Cinética de Oxidação.....	76
5.5	Propriedades Físico-Químicas.....	79
5.5.1	Propriedades termodinâmicas.....	79
5.5.2	Propriedades de transporte.....	80
5.6	Modelagem e Equacionamento de Transporte e Reação.....	82
6.	RESULTADOS DE SIMULAÇÃO - APRESENTAÇÃO E ANÁLISE.....	92
6.1	Cálculo da Espessura da Camada Limite e da Injeção de Massa.....	93
6.2	Simulação da Formação de Hidrocarbonetos.....	103

7. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES..... 114

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... 116

APÊNDICE A - Resultados de Ensaio Dinamométricos

APÊNDICE B - Listagem dos Programas Computacionais

B1. Programa de cálculo da camada limite e massa de ajuste

B2. Programa da formação de hidrocarbonetos

B3. Programa dos cálculos complementares

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 – Evolução da concentração e fluxo mássico de HC.....	6
Figura 3.2 – Esquema de escoamento do HC no cilindro.....	6
Figura 3.3 – Esquema ilustrativo das fontes de HC.....	10
Figura 3.4 – Variação da emissão de HC e da freqüência da anormalidade na combustão com a fração de gases queimados.....	15
Figura 3.5 – Evolução da concentração de combustível.....	22
Figura 3.6 – Reatividade do combustível-tempo necessário para que ocorra 50% da reação e emissão de HC.....	23
Figura 3.7 – Efeito da razão ar-combustível relativa nas emissões em motor a gás.....	28
Figura 3.8 – Modelo termodinâmico de combustão quase-dimensional.....	37
Figura 3.9 – Comparação entre coeficientes empíricos de transferência de calor, propostos por diversos autores, e dados experimentais.....	43
Figura 4.1 – Bancada de análise de gases de exaustão.....	53
Figura 4.2 – Sistema de coleta de amostras.....	53
Figura 4.3 – Vista externa da central de gases.....	53
Figura 4.4 – Vista interna da central de gases	53
Figura 4.5 – Detalhe das linhas de gases para bancada de análise.....	54
Figura 4.6 – Painel de ajuste de pressão de gases.....	54
Figura 4.7 – Sistema de aquisição de dados de baixa taxa de amostragem.....	54
Figura 4.8 – Sistema de análise de combustão em motores.....	54
Figura 4.9 – Detalhe do sistema de medição do consumo de ar de admissão.....	55
Figura 4.10 – Medidor mássico de gás combustível, instalado na área de preparação de motores.....	55

Figura 4.11 – Sala de combustíveis, com detalhes do sistema de purga e distribuição de gás para as salas dinamométricas, das cestas de gás natural e de cilindros de propano e butano para preparação de misturas.....	55
Figura 4.12 – Detalhe da localização do transdutor de pressão instalado no cabeçote.	56
Figura 4.13 – Motor instrumentado, montado na bancada dinamométrica.....	56
Figura 4.14 – Motor instrumentado.....	56
Figura 4.15 – Sala de dinamômetro com sistema de ar condicionado.....	56
Figura 4.16 – Sala de controle do dinamômetro, dos equipamentos e instrumentação de ensaio.....	57
Figura 5.1 – Esquema do fluxo de mistura não queimada (jato) saindo da região das frestas.....	61
Figura 5.2 – Esquema da malha para cálculo numérico de problema bidimensional....	66
Figura 6.1 – Velocidades instantânea do pistão e média de saída do jato das frestas...	92
Figura 6.2 – Ajuste da pressão e razão de elevação da pressão no cilindro.....	94
Figura 6.3 – Perfis instantâneos da camada limite do jato.....	95
Figura 6.4 – Perfil da camada limite e da velocidade $u - 40^\circ$ após PMS.....	97
Figura 6.5 – Perfil da camada limite e da velocidade $u - 80^\circ$ após PMS.....	98
Figura 6.6 – Perfil da camada limite e da velocidade $u - 140^\circ$ após PMS.....	99
Figura 6.7 – Evolução da espessura da camada limite do jato.....	102
Figura 6.8 – Evolução da espessura da camada de expansão.....	102
Figura 6.9 – Evolução da massa de ajuste, para diversas seções do cilindro.....	103
Figura 6.10 – Perfis da temperatura e das concentrações de metano e oxigênio; gás A - 50% de queima; camada limite do jato.....	105
Figura 6.11 – Perfis da temperatura e das concentrações de metano e oxigênio; gás A - 50% de queima; camada limite de expansão.....	106

Figura 6.12 – Perfis da temperatura e das concentrações de metano e oxigênio; para $N_y = 300$	107
Figura 6.13 – Evolução da temperatura, do HC das frestas e do HC não queimado no cilindro; gás A - 2800 rpm e 100% de carga.....	109
Figura 6.14 – Evolução da temperatura, do HC das frestas e do HC não queimado no cilindro; gás A - 2800 rpm e 50% de carga	109

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Contribuição relativa das fontes de HC.....	17
Tabela 4.1 – Especificações básicas do motor M 366 G.....	47
Tabela 4.2 – Composição e propriedades das misturas combustíveis simuladas.....	51
Tabela 4.3 – Resumo dos resultados de ensaios.....	52
Tabela 6.1 – Resumo dos resultados de simulação.....	112

LISTA DE SÍMBOLOS

A	fator de reação química
$c\mu$	constante de proporcionalidade de dissipação turbulenta
C_m	velocidade média do pistão
C_p	calor específico a pressão constante
D	diâmetro difusividade mássica
E	energia de ativação
EGR	recirculação parcial dos gases de escape
h	coeficiente convectivo instantâneo espessura, altura
Δh	calor gerado por reação química
H/C	relação hidrogênio-carbono
i	vetor tempo
j	vetor na direção axial ao cilindro
k	vetor na direção radial ao cilindro
k	razão entre calores específicos
k_t	energia cinética de turbulência
l	escala integral de comprimento
m, M	massa
M	peso molecular
P	pressão
PMI	ponto morto inferior
PMS	ponto morto superior
rpm	velocidade angular do virabrequim em rotações por minuto
R	constante dos gases perfeitos
s	deslocamento do pistão
S	termo fonte
S_p	velocidade média do pistão
THC	hidrocarbonetos totais
NMHC	hidrocarbonetos não-metano
t	tempo

T	temperatura
u	velocidade na direção axial
u'	intensidade de turbulência
v	velocidade na direção radial
V	volume
VC	volume de controle
VA	válvula de admissão
VE	válvula de escape
w	velocidade característica
$\dot{\omega}$	razão de geração ou consumo de espécie química
x	coordenada na direção axial ao cilindro
X	fração mássica
y	coordenada na direção radial ao cilindro
YE	espessura da camada limite
[]	concentração de espécie química

Símbolos gregos

η	coordenada adimensional
λ	razão ar-combustível relativa
λ_T	condutibilidade térmica
μ	viscosidade dinâmica
ν	viscosidade cinemática
	difusividade geral
ρ	massa específica

Subscritos

<i>ar</i>	ar atmosférico
<i>c</i>	cilindro
<i>fr</i>	frestas

<i>g</i>	gás
<i>i</i>	espécie química
<i>l</i>	laminar
<i>t</i>	turbulenta
<i>w</i>	parede
<i>0</i>	condição inicial

Números adimensionais

<i>Nu</i>	número de <i>Nusselt</i>
<i>Pr</i>	número de <i>Prandtl</i>
<i>Re</i>	número de <i>Reynolds</i>

RESUMO

Uma maior conscientização ambiental tem despertado no país muito interesse em relação à utilização do gás natural, como combustível no transporte público.

Quando em substituição ao óleo diesel, usado nas frotas de ônibus dos grandes centros urbanos, o gás natural veicular possibilita substancial redução da emissão de particulados; comparativamente à gasolina, nota-se redução de emissão de hidrocarbonetos, notadamente os reativos.

É neste quadro de crescentes esforços dedicados ao desenvolvimento de motores movidos a gás natural, que tem se revelado a importância dos estudos voltados à compreensão dos mecanismos de formação e emissão de poluentes, principalmente dos hidrocarbonetos, devido à natureza complexa dos fenômenos fluido-mecânicos e químicos envolvidos.

O objetivo central do estudo foi o desenvolvimento de modelo simulador da formação e emissão de hidrocarbonetos em motores de ignição por centelha (Otto) operando com gás natural, levando-se em conta os mecanismos de expansão, após a fase de combustão principal, do combustível não queimado retido nas frestas da câmara de combustão, a difusão deste em direção às regiões centrais do cilindro, contendo produtos da combustão a altas temperaturas, e sua subsequente reação química - pós oxidação dos hidrocarbonetos.

A partir de modelo unidimensional de transporte e oxidação dos gases não queimados que emergem das frestas, foi elaborado um programa computacional capaz de estimar os níveis de emissões de hidrocarbonetos em motores a gás.

Os resultados da simulação apresentaram tendências coerentes com relação às variações operacionais do motor (carga e rotação) e indicaram que o modelo simulador respondeu

às variações de evolução da temperatura no cilindro, representadas pela mudança de gás combustível.

Análise comparativa com dados experimentais indicaram que em geral, exceção para a operação em carga parcial, as frações de metano que permaneceram não queimadas no cilindro foram subestimadas. Tal constatação, reforçada pelo fato de terem sido encontrados na simulação valores relativamente baixos de temperatura mínima de oxidação, leva à consideração de que a razão de queima dos hidrocarbonetos possa ter sido superestimada, provavelmente em decorrência do emprego de uma relação global de oxidação do metano, não propriamente adequada para as faixas de temperatura e pressão do ciclo de trabalho de motores de combustão interna.

ABSTRACT

The use of natural gas as an alternative to conventional fuels in urban transportation has received a great deal of attention as a strategy for reducing air pollution resulting from the exhaust emissions of motor vehicles. The main potential benefits are, in the case of diesel substitution, the almost complete elimination of particulate emissions and for gasoline engines the reduction of non-methane hydrocarbons (reactive category).

As standards for hydrocarbon emissions from vehicles become more stringent due to environmental concerns, considerable effort has been devoted to investigate the mechanisms of formation, transport, and oxidation of unburned hydrocarbons in spark ignition engines.

In order to understand controlling factors in the processes, a transient one-dimensional reactive-diffusive model has been formulated for simulating the oxidation process taking place in the reactive layer between hot burned gases and cold unreacted air/fuel mixture, and for estimating exhaust hydrocarbon emission levels from natural gas spark ignition engines.

The main innovation shown by the model is the consideration also of the expansion of crevice gas in the axial direction. The model takes into consideration the contribution of the top land piston-ring crevice phenomenon, this being the main unburned hydrocarbon source in natural gas engines.

A comparison of the simulation results with experimental emission measurements shows an underprediction of the calculated remaining hydrocarbons in cylinder, probably because of the one-step kinetic mechanism employed for the oxidation of methane.

1. INTRODUÇÃO

Regulamentações progressivamente mais restritivas com relação às emissões veiculares impulsionam, a nível mundial, a utilização do gás metano, principalmente na forma de gás natural, como combustível no transporte público.

No país, maior conscientização relacionada à melhoria da qualidade do ar nos grandes centros urbanos, com os benefícios sociais decorrentes, aliada à preocupação por alternativas economicamente atrativas ao óleo diesel, que é o derivado crítico no panorama energético nacional, vem justificando esforços dedicados ao desenvolvimento de motores de ignição por centelha movidos a gás natural.

Na cidade de São Paulo, em particular, legislação municipal de 1991 (complementada em 1996), determina o ano de 2006 como prazo para que os motores Diesel da frota urbana de ônibus, cerca de 12 mil unidades, sejam convertidos para uso do gás natural, segundo uma programação definida e gerenciada pelo poder municipal.

A utilização do gás natural veicular possibilita reduções substanciais dos teores de particulados nos gases de exaustão do motor, quando em substituição ao óleo diesel, e de emissão de hidrocarbonetos, notadamente os reativos, no caso da gasolina.

Valores típicos de emissão de compostos orgânicos como hidrocarbonetos não queimados ou parcialmente queimados (HC) no sistema de escape de motores de ignição por centelha correspondem a cerca de 2% do consumo de combustível, sendo que aproximadamente a metade é constituída por combustível não queimado e a outra metade por compostos intermediários da combustão, ou componentes parcialmente queimados.

Mesmo considerando que nos veículos atuais catalisadores removem acima de 80% desta emissão, observa-se que 0,4% do combustível consumido é lançado na atmosfera na forma de HC parcialmente ou não queimado. Valor suficientemente preocupante para que estudos intensivos venham sendo conduzidos nos últimos 30 anos, para identificar as origens e os mecanismos mais importantes de formação de HC em motores.

Um modelo físico-químico detalhado de formação e transformação do HC não queimado em motores de ignição por centelha ainda não é possível, devido à natureza complexa dos fenômenos fluido-mecânicos e químicos envolvidos. No entanto, medições experimentais e considerações acerca dos fatores que controlam tais processos, concorrem para justificar hipóteses simplificadoras empregadas no desenvolvimento de simuladores computacionais para estimar as emissões de HC em motores.

Modelos de mecanismos de formação de poluentes, conjuntamente com a análise do processo de combustão, constituem uma importante ferramenta de trabalho visando a redução dos níveis de emissão, através da otimização de parâmetros construtivos e operacionais de motores de combustão interna.

Dentro deste contexto, este trabalho pretende contribuir para uma melhor compreensão do fenômeno através do desenvolvimento de modelos de simulação computacional, que representem a formação da camada limite de mistura não queimada, que se forma a partir da expansão dos gases acumulados nas frestas do pistão, bem como sua posterior oxidação, após a passagem da frente de chama dentro da câmara de combustão.

O estudo se insere no escopo mais amplo de simular numericamente o desempenho, consumo e emissões de poluentes de motores a gás natural de ignição por centelha.

2. OBJETIVOS

O enfoque central do estudo foi o desenvolvimento de modelo simulador da formação e emissão de hidrocarbonetos em motores de ignição por centelha (Otto) operando com gás natural, levando-se em conta os mecanismos de expansão, após a fase de combustão principal, do combustível não queimado retido nas frestas da câmara de combustão, a difusão deste em direção às regiões centrais do cilindro, contendo produtos da combustão a altas temperaturas, e sua subsequente reação química - pós oxidação dos hidrocarbonetos.

Face a limitações computacionais para abordar a formação da camada limite a partir da expansão dos gases contidos nas frestas, concomitantemente com sua oxidação, modelou-se o fenômeno em duas etapas:

- modelamento da formação da camada limite a partir da expansão dos gases das frestas, não considerando os efeitos de oxidação e de troca de calor e massa com os gases queimados, e elaboração do modelo computacional correspondente - bidimensional e transiente; dessa maneira, estimou-se a troca de massa na direção axial, ao longo da camada limite adjacente às paredes do cilindro;
- modelamento unidimensional de transporte radial e oxidação dos gases não queimados depositados em cada seção da camada limite; para se levar em conta o transporte convectivo axial, estimado na primeira etapa, considerou-se um termo de vazão mássica (injeção ou retirada de massa da camada limite, através da parede).

A elaboração do programa computacional correspondente permitiu calcular a fração de combustível que sofreu pós oxidação em cada seção do cilindro, e estimar os níveis de emissão de hidrocarbonetos em motores a gás.

O modelo utilizou, na forma de dados de entrada, resultados de análise termodinâmica desenvolvida recentemente para o ciclo de trabalho de motores Otto operando com gás - evolução da pressão e temperatura, com considerações a respeito da propagação da frente de chama, composição e propriedades físico-químicas do gás natural combustível.

Um segundo objetivo da pesquisa, complementar ao desenvolvimento da simulação da formação e emissão de hidrocarbonetos, tratou da avaliação da adequação do programa simulador, através de uma confrontação de resultados de cálculos com dados experimentais obtidos de ensaios dinamométricos em motor a gás utilizado em ônibus urbanos.

3. REVISÃO E ANÁLISE BIBLIOGRÁFICA

3.1 Mecanismos de Formação de Compostos Orgânicos - Hidrocarbonetos

A importância dos estudos voltados à compreensão dos mecanismos de formação, transporte e pós oxidação dos hidrocarbonetos em motores de ignição por centelha foi particularmente reforçada na última década, num quadro globalizado de regulamentações cada vez mais restritivas em relação às emissões poluentes veiculares.

As emissões de hidrocarbonetos não queimados ou parcialmente queimados (HC) nos gases de escapamento em motores são geralmente especificadas em termos de concentração total de hidrocarbonetos. Enquanto que a emissão total de hidrocarbonetos é uma medida usual da ineficiência da combustão, necessariamente não significa um índice de emissões de poluentes, pois alguns compostos (por ex. parafinas) podem ser considerados inertes ou não-reativos, tanto do ponto de vista de saúde do ser humano, como para a formação do "smog" fotoquímico na atmosfera, enquanto que outros são reconhecidamente cancerígenos (HEYWOOD, 1988).

Medições experimentais resultaram no cálculo da evolução da concentração e do fluxo mássico de HC através da válvula de escape, representado na figura 3.1, onde estão claramente caracterizados 2 picos. Aproximadamente 45% do HC deixa o cilindro no início da fase de exaustão, logo após a abertura da válvula de escape, e 55%, próximo ao fim desta fase (TABACZYNSKI *et al.*, 1972 ; PANESAR *et al.*, 1988).

Este comportamento experimental originou modelo de transporte do HC não queimado, no sistema cilindro-duto de escape, descrito em LAVOIE *et al.* (1980a; 1980b) e ampliado por STACHE e ALKIDAS (1997), representado graficamente na figura 3.2.

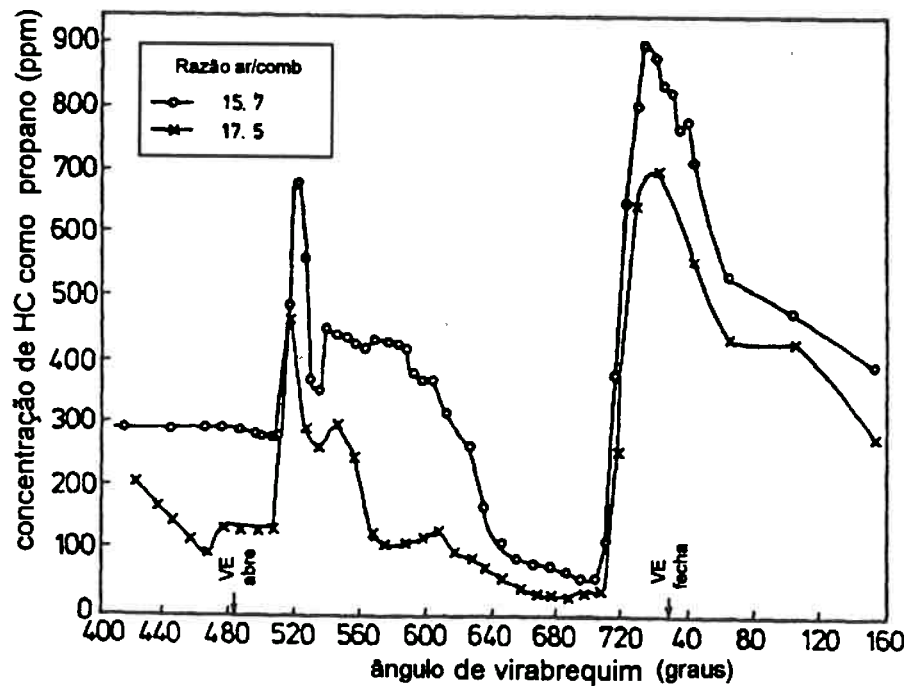


Fig. 3.1 - Evolução da concentração e fluxo mássico de HC (PANESAR *et al.*, 1988).

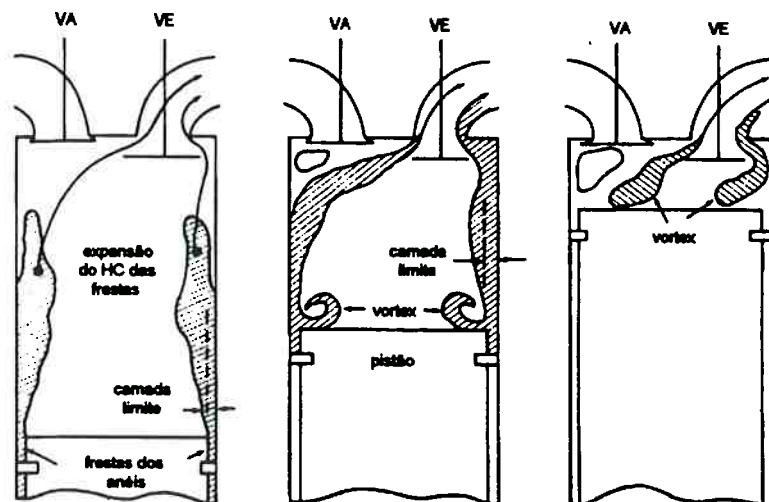


Fig. 3.2 - Esquema de escoamento do HC no cilindro (LAVOIE *et al.*, 1980).

O primeiro pico de concentração de HC é devido a um ou mais dos seguintes mecanismos:

- os gases que deixam inicialmente o cilindro contém alta concentração de HC, e são originados da expansão do HC proveniente das regiões de frestas (principalmente junta do cabeçote e frestas das válvulas), do filme de óleo e camada limite de extinção de chama, situados nas proximidades da válvula de escape; e subsequente mistura com os gases produtos da combustão principal, que estão deixando o cilindro; uma parte deste HC que se expande para dentro do cilindro, notadamente da região da fresta do topo do pistão, é deixada ao longo das paredes do cilindro, devido ao movimento de arraste descendente do pistão, formando uma camada limite de gases não-queimados;
- eventuais gases, com alta concentração de HC, podem vazar através da válvula de escape durante a fase de compressão e, devido ao baixo nível de quantidade de movimento, ficam estagnados logo atrás da válvula, se misturando com o fluxo de saída dos gases provenientes do cilindro;
- gases deixados no coletor de escape no ciclo prévio, ficam estagnados e podem ser empurrados pelos gases saindo do cilindro.

Após o primeiro pico, a concentração de HC decai rapidamente e segue-se um período de baixa concentração, no qual estão saindo os gases queimados durante o processo normal de combustão (baixa concentração de HC), juntamente com o combustível previamente condensado nas paredes, que conseguiu vaporizar uma segunda vez e se misturar nos gases de exaustão.

Próximo ao ponto morto superior - PMS, a concentração de HC se eleva novamente formando o segundo pico. Este aumento é devido ao HC proveniente principalmente

das frestas do pistão, e que foi deixado junto à parede do cilindro no curso de expansão. Durante o movimento ascendente do pistão, na fase de exaustão, esses hidrocarbonetos são raspados da parede e se acumulam em um vórtice toroidal no topo do pistão. Esta massa de HC deixa o cilindro apenas no final da fase de exaustão.

STACHE e ALKIDAS (1997), sugeriram que combustível líquido, devido à baixa temperatura do refrigerante, poderia ficar retido nas frestas do pistão, contribuindo adicionalmente para a elevação de HC no final da fase de expansão e concluíram que a redução dos volumes de frestas do pistão, além de reduzir as emissões com o motor aquecido, reduziria a contribuição do combustível líquido, que é o mecanismo dominante sob condições de aquecimento, com o motor ainda frio.

Após o PMS e até o fechamento da válvula de escape, a concentração de HC decai como consequência da mistura com o fluxo de retorno para o cilindro. Durante o período de fechamento da válvula de escape a concentração de HC continua a decrescer, já devido à pós-oxidação no sistema de exaustão.

Os processos de formação de HC podem ser agrupados em 2 estágios subsequentes: as denominadas fontes de HC, ou seja, diversos mecanismos que impedem a queima dentro do cilindro de frações de combustíveis, durante o processo normal de propagação da chama, e, processos posteriores de oxidação de parte deste HC, tanto dentro do cilindro (durante parte da fase de expansão e na fase de exaustão) como no sistema de escape.

Para facilidade de compreensão, as fontes de HC podem ser didaticamente divididas como segue:

- mistura combustível comprimida dentro das frestas da câmara de combustão;
- combustível absorvido no filme de óleo lubrificante das paredes do cilindro;

- óleo lubrificante parcialmente oxidado que pode ser arrastado pelos gases de escape;
- combustível absorvido e/ou contido nos depósitos na câmara de combustão;
- extinção da chama - combustão incompleta, próximo às paredes frias da câmara de combustão e mesmo no interior dos gases do cilindro;
- combustível na fase líquida, condensado ou que não sofreu processo de evaporação e mistura com o ar, até o final da combustão;
- vazamento de mistura de gases não queimados através da válvula de escape.

Processos de oxidação do HC não queimado podem ser esquematizados como segue:

- expansão e saída da mistura combustível não queimada das frestas, processos de mistura com os gases queimados e oxidação parcial;
- desorção e difusão do HC não queimado, proveniente do filme de óleo e dos depósitos, nos gases queimados e oxidação parcial;
- mistura do HC, proveniente da camada de extinção da chama, próxima à parede ou dos volumes que sofreram extinção prematura da combustão, com os gases queimados no cilindro e subsequente oxidação parcial;
- HC que deixa o cilindro, se mistura com os gases de exaustão, ainda a altas temperaturas, e se oxida parcialmente no sistema de escape.

Mecanismo envolvendo frestas

Fluxos gasosos - mistura combustível, ar e gases residuais de combustão - ocorrem entre a câmara de combustão e frestas ou folgas, que são pequenos volumes com entradas estreitas (máximo de décimos de mm), nas quais a frente de chama não consegue se propagar, devido à significativa troca de calor através dessas paredes muito próximas. A influência de variáveis operacionais do motor - razão ar-combustível,

avanço de ignição, recirculação de gases queimados - no parâmetro espessura de fresta para extinção de chama foi objeto de extenso trabalho de ISHIZAWA (1996).

A figura 3.3 indica as diferentes regiões de frestas que podem contribuir para a formação de HC, sendo que as mais importantes, responsáveis pela maior parte do fenômeno, são os volumes compreendidos entre pistão, região dos anéis e camisa do cilindro (cerca de 80% do volume total de frestas); outros volumes compreendem as reentrâncias das roscas dos eletrodos das velas de ignição, folgas ao redor das cabeças das válvulas de admissão e escape, espaço entre o bloco do motor, cabeçote e juntas.

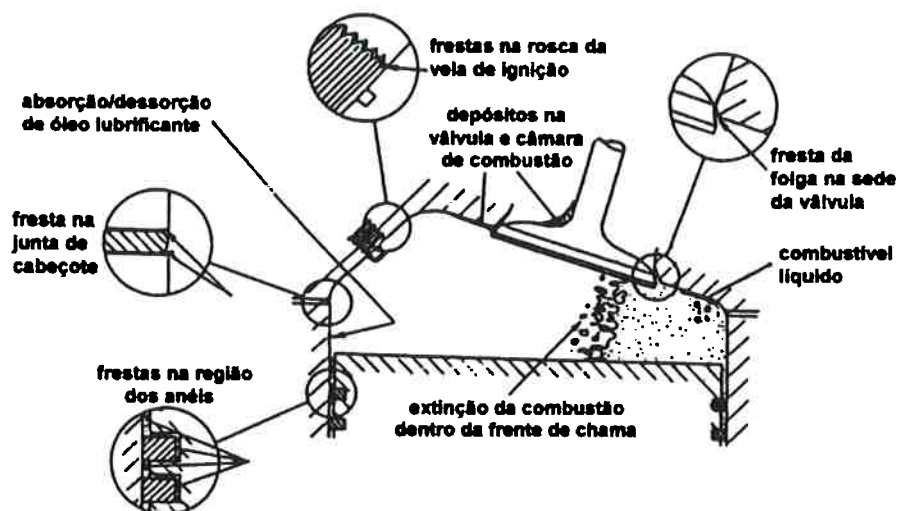


Fig. 3.3 - Esquema ilustrativo das fontes de HC (CHENG *et al.*, 1993).

O processo de formação de HC devido a estas fontes pode ser sumarizado como segue: Mistura combustível é comprimida dentro das regiões de frestas durante os processos de compressão e combustão, quando há uma elevação da pressão dentro do cilindro. Após a chegada da frente de chama às frestas, e subsequente extinção, se a pressão

continuar a subir, também gases queimados adentram estas regiões (neste caso, a localização da vela de ignição tem papel de destaque).

Como as frestas são estreitas, os gases em seu interior rapidamente se esfriam, até próximo a temperatura das paredes, caracterizando, portanto, regiões contendo gases com densidade várias vezes maior do que a densidade dos gases no interior do cilindro.

Assim que a pressão decai, durante a fase de expansão, os gases das frestas fluem de volta ao cilindro; geralmente assume-se para efeito de cálculo dessa massa, pressão igual à do cilindro e temperatura das paredes. Note que o volume das frestas na região dos anéis depende da condição de operação do motor (variação de até 30% é esperada).

Mais adiante maior atenção será dada ao detalhamento deste mecanismo, uma vez que foi adotado como a fonte fundamental na formação de HC em motor a gás.

Mecanismo relacionado ao óleo lubrificante

Absorção de mistura combustível ocorre na película de óleo lubrificante, em toda sua espessura - 2 a 5 μm (FROLUND ; SCHRAMM., 1997), que vai sendo exposta quando do movimento descendente do pistão na fase de admissão, até ser coberta na fase de compressão.

Durante as fases de expansão e exaustão, este filme de óleo é exposto aos gases queimados, filme que contém alta concentração de compostos combustíveis, relativamente aos gases queimados (concentração quase nula) e, inicia-se o processo de dessorção de HC do óleo e sua difusão nos gases do cilindro.

Na interface óleo/gás é admitida a lei de Henry, que correlaciona a pressão parcial de cada componente do combustível com a respectiva fração molar dessorvida do óleo,

através da constante de Henry - fortemente dependente da temperatura e composição do combustível (LINNA *et al.*, 1997).

A importância relativa do mecanismo de absorção de HC em filme de óleo é ainda uma área de intensa pesquisa e resultados conflitantes continuam a aparecer na literatura, notadamente experiências com combustíveis líquidos (gasolina, xileno, entre outros). Artigo de CHENG *et al.* (1993) sugeriu ser este mecanismo responsável por 15 a 20% das emissões de HC não queimado, enquanto que KAISER *et al.* (1995a) ; LINNA *et al.* (1997) ; ENG *et al.* (1997a) sustentaram valores de contribuição da ordem de 5% a 10%, durante operação em regime, e segundo RUSS *et al.* (1995), em condição de aquecimento do motor, nenhum acréscimo dessa contribuição foi observado.

Ilustrativo desta discussão com relação à contribuição do filme de óleo na formação de HC, é o trabalho de SCHRAMM e SORENSON (1990), que apresentou uma modelagem para as emissões de HC - mecanismo de frestas e óleo lubrificante, concluindo ser este último responsável por cerca de 30% do HC no escape. O mesmo grupo de pesquisadores publicou recentemente (FROLUND ; SCHRAMM, 1997) simulação das emissões de HC, atualizando modelo referente ao fenômeno de absorção-dessorção no óleo (inclusão da dependência com a temperatura do coeficiente de difusão e da constante de Henry, entre outros) e concluiu que no novo modelo a contribuição deste fenômeno se restringe a 13% das emissões de HC, valor mais próximo daqueles propostos nos demais estudos recentes.

Para motores a gás, nenhuma variação nas emissões de HC foram observadas quando diferentes quantidades de óleo foram injetadas no cilindro, diferentemente do motor a gasolina; observe-se que neste último o acréscimo de HC no escape proveio do combustível, e não de compostos do óleo lubrificante.

Resultados de experimentos conduzidos por SCHRAMM e SORENSON (1989), e confirmados recentemente por trabalho de LINNA *et al.* (1997), indicaram que a solubilidade dos combustíveis afetou relativamente pouco as emissões de HC, enquanto que a influência da composição, viscosidade e temperatura do filme de óleo (função da temperatura das paredes) foi desprezível (FRANK ; HEYWOOD, 1991 ; LINNA *et al.*, 1997 ; PETRIS *et al.*, 1997;). Observação adicional foi feita com relação ao efeito da contribuição do mecanismo de absorção-dessorção do filme de óleo ser maior em operação com misturas pobres, ressaltando-se neste caso a importância do processo de pós-oxidação conectado a este mecanismo.

Experimentos realizados por KAISER *et al.* (1995a) com combustíveis de características bem diversas - alcanos e aromáticos, com grande variação nas curvas de destilação e nos valores de solubilidade do combustível no óleo (variação de até fator 60) - sugeriram que o mecanismo de absorção-dessorção do combustível no filme de óleo não seria fonte significativa de emissão de HC, para temperaturas do fluido refrigerante acima de 67°C (340 K).

Mecanismo relacionado a depósitos

Após prolongado funcionamento, motores a gasolina apresentam depósitos porosos nas paredes da câmara de combustão e nas sedes das válvulas de admissão. Resultados experimentais indicaram que os processos de absorção e dessorção de vapor de combustível nestes depósitos poderiam vir a contribuir significativamente para as emissões de HC, em até cerca de 10%.

Já trabalho recente de KALGHATGI (1997) mostrou resultados controversos em motores monocilindros de pesquisa, utilizando diferentes formatos de câmara de

combustão. Dependendo da condição de operação, observou-se acréscimo nas emissões de HC (até 30% em cargas parciais); entretanto, resultados com câmara plana mostraram progressiva redução das emissões de HC (até 50%) com a formação de depósitos, provavelmente devido à ação concomitante de diversos outros fenômenos influenciando os processos envolvidos de absorção, dessorção e pós-oxidação.

Mecanismo de extinção da chama

Neste mecanismo ocorre inibição das reações de oxidação dos hidrocarbonetos, provocada pelo contato dos gases combustíveis com as paredes (resfriadas) da câmara de combustão. Ao se extinguir a pouca distância das paredes - décimos de milímetros (STANGLMAIER *et al.*, 1997), a frente de chama deixa uma camada delgada de gases combustíveis, adjacentes a estas paredes. Tal processo era tido como o principal mecanismo de formação de HC, nas décadas de 60 e 70, no entanto admite-se atualmente que estes gases se difundem rapidamente nos produtos da combustão, a altas temperaturas, queimando durante a fase de expansão (WESTBROOK ; DRYER, 1984 ; SCHRAMM ; SORENSON, 1989).

Mais significativo para a emissão de HC é o fenômeno de extinção prematura da frente de chama no interior da carga de mistura combustível - combustão incompleta, que ocorre em condições limites de pobreza da mistura ou altas taxas de diluição, resultante do emprego da tecnologia de recirculação parcial dos gases de escape - EGR. No ciclo sob estas circunstâncias a emissão de HC é muito alta, e o valor médio de emissão vai depender da frequência de ocorrência destes ciclos de combustão parcial.

Tal mecanismo é de extrema importância em misturas pobres (excesso de ar), misturas diluídas por gases residuais ou EGR, ou mesmo pela heterogeneidade da mistura ar-

combustível, resultando em regiões localmente ricas e/ou pobres na câmara de combustão (BOWMAN, 1975). Menores valores de pico de temperatura, nas porções iniciais de mistura que se queimam, ocasionam menor compressão e transferência de calor para os volumes adjacentes não-queimados, reduzindo a velocidade de propagação da frente de chama, que pode se extinguir.

A figura 3.4 mostra o grande acréscimo de HC nos gases de escape, quando fenômenos de combustão parcial ou incompleta são detectados em alguns dos ciclos.

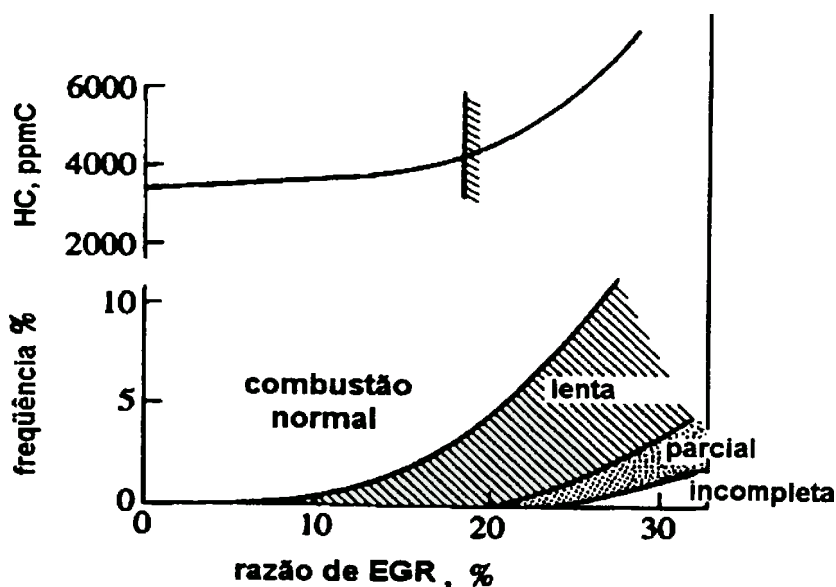


Fig. 3.4 - Variação da emissão de HC e da frequência de anormalidade na combustão com a fração de gases queimados (HEYWOOD, 1988).

Mecanismo relacionado a combustível líquido na câmara

A quantidade de combustível no cilindro na fase líquida (não evaporado ou condensado), portanto não participando do processo de combustão, é significativa durante a fase de aquecimento do motor, especialmente para as frações menos voláteis do combustível. Para averiguar a contribuição deste mecanismo, usualmente injeta-se

combustível gasoso, para se eliminar esta fonte de HC - ensaio referência - e em seguida, procede-se aos ensaios com injeção de combustível líquido em diversas condições de operação.

Artigo de STACHE e ALKIDAS (1997) mostrou que um aumento nas emissões de HC foi observado, quando se diminuiu a temperatura do fluido refrigerante em dois motores pesquisados - um motor a gás propano e outro com injeção de gasolina. O primeiro apresentou aumento desprezível das emissões de HC, devido provavelmente ao aumento de densidade nos volumes de frestas, enquanto que no segundo a elevação foi substancial - segundo experimento de RUSS *et al.* (1995) da ordem de 0,75% HC para cada °C de temperatura, sugerindo neste caso a importância da condensação de vapor de combustível nas superfícies frias da câmara de combustão, mecanismo proposto por STANGLMAIER *et al.* (1997).

Mecanismo de vazamento

Experimentos apresentados na literatura mostraram que pode ocorrer vazamento de mistura combustível para o duto de escape antes do processo de combustão, principalmente em motores já operando por longo período e com manutenção deficiente; na ocorrência de vazamento, tal fonte de emissão de HC é pequena, menos de 5% do total de HC no escape (CHENG *et al.*, 1993).

Processo de pós oxidação

Findo o processo normal de combustão, os hidrocarbonetos não queimados provenientes das diversas fontes anteriormente mencionadas, podem sofrer oxidação total ou parcial dentro do cilindro ou no sistema de exaustão, dependendo da temperatura dos produtos da combustão e da disponibilidade de oxigênio.

Considerando as fontes que produzem misturas ar-combustível - frestas e extinção de chama - trabalho de CHENG *et al.* (1993) estimou que 2/3 do HC não queimado poderia sofrer pós oxidação dentro do cilindro; para fontes de vapor de combustível não queimado - filme de óleo, depósitos e combustível líquido - apenas 1/3 sofreria uma pós queima no cilindro. Medições indicaram que para motores operando em regime (aquecidos), com mistura estequiométrica (alta temperatura de escape) e razões de compressão usuais para motores a gasolina, cerca de 1/3 do HC que deixa o cilindro poderia ainda queimar no sistema de exaustão.

Avaliação quantitativa constante neste trabalho, para a contribuição relativa das diversas fontes nas emissões de HC é resumida na tabela 3.1; os autores ponderaram que, apesar dos valores serem estimados e apenas indicativos, vários experimentos comprovavam sua validade.

Tabela 3.1 - Contribuição relativa das fontes de HC (CHENG *et al.*, 1993).

FONTE	% combustível não participante da combustão	% EMISSÕES HC
frestas	5,2	38
filme de óleo	1,0	16
depósitos	1,0	16
extinção da chama	0,5	5
combustível líquido	1,2	20
vazamento	0,1	5
TOTAL	9,0	100

3.2 Formação e Emissão de Hidrocarbonetos em Motores a Gás

A partir da análise bibliográfica aqui tratada, pretendeu-se delinear conceitos, de modo a justificar hipóteses simplificadoras para o desenvolvimento de modelo de formação e emissão de HC em motores a gás.

Experimentos muito citados na literatura foram conduzidos por KAISER *et al.* (1991), a respeito da emissão total de HC, assim como análise de sua composição, para motor operando em regime permanente com combustíveis gasosos puros - metano, etano, propano, n-butano, entre outros.

A primeira consideração do trabalho tratou da constatação de que, durante operação com combustíveis gasosos e mistura pobre (razão ar-combustível relativa $\lambda \sim 1,1$), apenas duas fontes primárias contribuiriam significativamente para emissão de HC: combustível retido nas frestas e absorvido no filme de óleo. Medições mostraram que o fenômeno de extinção da chama (combustão incompleta) só contribuiu em casos excepcionais, quando o motor operava a níveis muito elevados de diluição de carga combustível; que também não é o caso do motor em estudo no presente trabalho.

Consideração adicional foi a respeito de combustíveis alcanos, formados por pequenas cadeias, que apresentaram efeito mínimo de absorção pelo filme de óleo, uma vez que a solubilidade destes combustíveis no óleo é muito pequena.

Portanto, para o gás natural, composto predominantemente por metano, a grande contribuição nas emissões de HC seria a retenção de combustível nas frestas, sendo considerada neste trabalho como única fonte.

Durante a fase de expansão, parte do gás comprimido nas frestas da câmara de combustão, principalmente na região do topo do pistão, sofre expansão para dentro do

cilindro, processo que se inicia a cerca de 30° de virabrequim após o PMS. Segundo NAMAZIAN e HEYWOOD (1982), esta expansão se dá a baixas velocidades e o fluxo é admitido laminar, sendo considerados números de Reynolds da ordem de 10 a 100.

Com o movimento descendente do pistão, este fluxo de mistura não queimada vai sendo “esparramado” ao longo da parede do cilindro e à medida que a pressão no cilindro decresce, aumenta a espessura desta camada, que exposta ao movimento turbulento de combustão no interior do cilindro e a altas temperaturas (maiores que 1800 K) vai diminuindo, até que reste somente um delgado filme de gases não queimados, da ordem de fração de milímetros, adjacente às paredes do cilindro. Tal película estaria embutida na porção da camada limite térmica, abaixo da temperatura mínima de oxidação dos hidrocarbonetos, à pressão reinante nesta fase do ciclo (cerca de 1300 K).

Portanto, é de se esperar que aumentando o volume das frestas do pistão, não se observe grandes alterações nas emissões de HC, uma vez que a principal contribuição destas fontes vem da fria camada adjacente às paredes do cilindro, de espessura praticamente invariável, que escapa da combustão principal.

Experimentos de MIN *et al.* (1994), comprovaram a baixa sensibilidade das emissões de HC quanto à variação do volume das frestas do pistão; variação de 10% nestes volumes causaram variação de apenas 2% no HC de escape.

Porém, uma parte dos gases provenientes das frestas da região do topo do pistão adentram as regiões posteriores e entre os anéis, e só se expandem, retornando ao cilindro num fluxo reverso, a cerca de 120° de virabrequim após o PMS, correspondendo aos fluxos em forma de jato, com velocidade em torno de 15 m/s, observados e documentados nos trabalhos de NAMAZIAN *et al.* (1980 e 1982). Tais

experimentos empregaram motor de pesquisa transparente com pistão quadrado, para observação fotográfica pelo método *Schlieren*, do fluxo e campos de densidade dos gases que entravam nas frestas do pistão e depois se expandiam para o interior do cilindro.

Diferentemente das frestas do pistão, a fresta da junta do cabeçote é estacionária, e o fluxo de HC proveniente desta entra no cilindro no início do processo de expansão, se misturando com os gases a altas temperaturas no cilindro, e se oxidando em sua maior parte. Porém, como as frestas da junta estão muito próximas à válvula de escape, no processo de exaustão quase todo o fluxo de HC ainda não queimado, proveniente desta fresta, sai pelo escape. Como resultado, variação de 10% neste volume ocasiona variação de 10 a 12% nas emissões de HC, muito mais sensível do que as frestas do pistão (MIN *et al.*, 1994).

WU e HOCHGREB (1997) demonstraram em seu trabalho sobre modelo de pós oxidação de HC, que para temperatura dos gases queimados no interior do cilindro abaixo de 1300 ~ 1400 K – para metano cerca de 1500 K, segundo WU *et al.* (1995), qualquer combustível emergente das frestas contribuiria para as emissões de HC, como produtos de oxidação parcial ou combustível não queimado, dependendo das condições de operação do motor. Trabalho de ENG *et al.* (1997a) apresentou confirmação de tal observação.

O processo de pós-oxidação no cilindro pode consumir de 50 a 90% do HC que escapa da combustão principal, quando da passagem da frente de chama, sendo que o processo de oxidação no sistema de escape é fortemente dependente de variações do tempo de residência, acoplado a mudanças na concentração de radicais livres.

Com o objetivo de analisar o fenômeno da pós oxidação em motor a gás, no trabalho de KAISER *et al.* (1991), foram identificadas as espécies de radicais livres que mais contribuíam para o consumo do combustível que deixava as frestas, se misturando com os gases quentes no cilindro. Cálculos feitos, baseados no equilíbrio químico e considerando intervalo de temperatura de 1500 a 2800 K, com mistura pobre ($\lambda \sim 1,1$), apresentaram o radical hidroxil OH com uma densidade 8 vezes maior do que aqueles que o seguiam em ordem de abundância, a saber, átomos de oxigênio O e hidrogênio H. E, a uma dada temperatura, quanto maior a relação H/C, maior a densidade de equilíbrio do OH nos gases queimados.

Trabalho de TAMURA e HOCHGREB (1992) apresentou modelo de oxidação de HC, considerando mistura homogênea de combustível e gases queimados, numa configuração de escoamento uniforme. Os autores observaram que à temperatura relativamente baixa reinante durante a fase de exaustão, as reações de recombinação de radicais se apresentaram lentas, notadamente OH formado no processo principal de combustão, causando aumento significativo da concentração destes radicais, em relação à concentração de equilíbrio a uma dada temperatura.

Apesar da grande diferença encontrada nas concentrações de OH, os autores compararam perfis simulados da evolução das frações molares dos produtos de oxidação parcial em motor operando com propano em mistura pobre ($\lambda \sim 1,1$), partindo das condições de equilíbrio e de não equilíbrio, ambas a 1200 K, e notaram que o efeito da alta concentração de OH (longe do equilíbrio) era significativo apenas no início do processo de oxidação. Baseado nesta constatação, assumiu-se no modelo simulador que, na condição inicial, os gases queimados estavam em equilíbrio na temperatura considerada.

Resultados interessantes, sintetizados na figura 3.5, foram obtidos a partir de simulação de oxidação de HC para cinco combustíveis puros - metano, etano, propano, n-butano e tolueno. Da figura pôde-se inferir que a oxidação de metano foi consistentemente mais lenta que os demais combustíveis alcanos, devido à produção do radical intermediário metil CH_3 , que apresentou muita dificuldade em oxidar. No entanto, o gás metano apresentou emissões de HC consideravelmente menores do que seria de se esperar, partindo de correlação com o tempo calculado de sua reação química (figura 3.6), sugerindo que o maior coeficiente de difusão do metano (proveniente da camada de HC na parede) seria responsável por um incremento do porcentual de HC que participa das reações de pós-oxidação no cilindro.

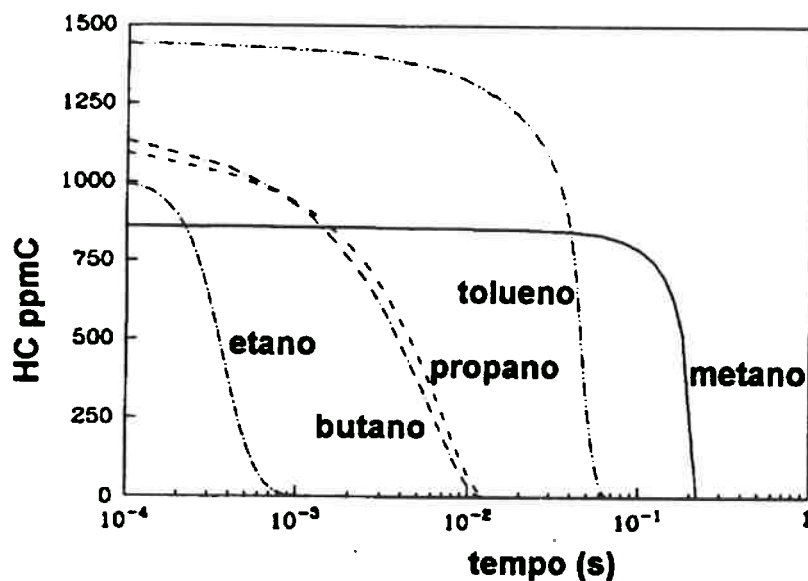


Fig. 3.5 - Evolução da concentração de combustível (TAMURA e HOCHGREB, 1992).

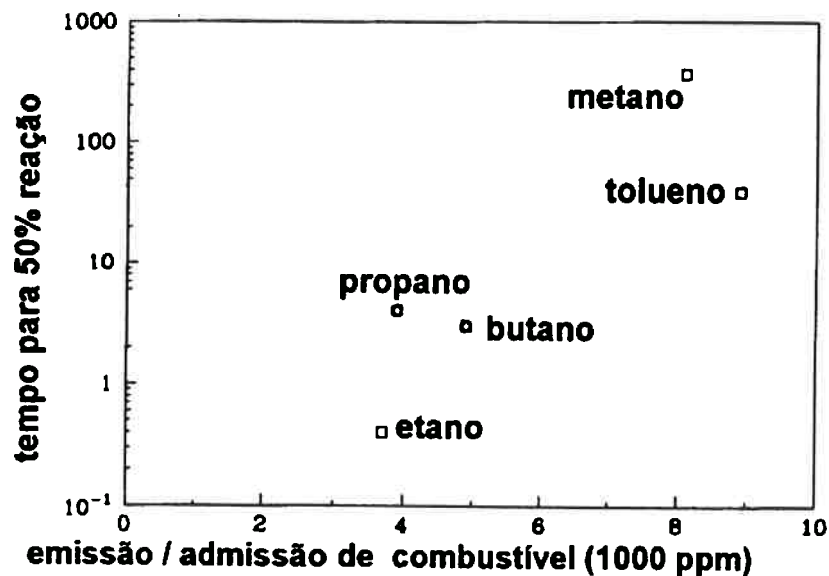


Fig. 3.6 - Reatividade do combustível - tempo necessário para que ocorra 50% da reação e emissão relativa de HC (TAMURA e HOCHGREB, 1992).

Isto posto, no que se refere à simulação aqui proposta do fenômeno de oxidação do metano não queimado, a idéia básica consistiu na consideração adicional do efeito de difusão deste nos gases de combustão, além da cinética química (que sozinha iria resultar em valores superestimados de emissão de HC).

Em trabalho de KAISER *et al.* (1995b) foi apresentado que, para operação com isoctano em mistura pobre ($\lambda \sim 1,1$), a elevação da rotação de 1500 para 2500 rpm reduziu em 50% a saída de HC do cilindro, enquanto que manteve constante a pós-oxidação do HC no sistema de escape, sugerindo que a turbulência dos gases dentro do cilindro, a altas velocidades do pistão, contribuiu substancialmente para a redução das emissões de HC.

RUSS *et al.* (1995) concluíram em seu trabalho que a elevação da razão de compressão de motor a gasolina (de 9,15:1 para 10:1) ocasionou um aumento de 20% das emissões de HC, em operação estequiométrica, sendo que houve aumento das emissões de combustível não queimado e redução de sub-produtos de reação. Uma vez que o pico de pressão aumentou, também aumentou a massa de combustível retida nas frestas e, devido às menores pressões e temperaturas no final da fase de exaustão, teve-se queda nas constantes das reações de pós-oxidação; adicionalmente, menor temperatura dos gases de escape, diminuíam a oxidação durante o processo de exaustão.

O objetivo do trabalho de HADJICONSTANTINO *et al.* (1996), foi investigar as emissões de HC em motor operando com propano sob condições de mistura muito pobre ($\lambda \sim 1,4$ a $1,5$). Nestas condições ocorria uma substancial diminuição da quantidade de gases que tomavam parte no processo de pós-oxidação, fenômeno responsável pelo expressivo aumento de emissões de HC - aproximadamente o dobro. Além disso, foi observada diminuição da velocidade da chama e a repetibilidade dos ciclos de combustão se deteriorou, ocasionando combustão incompleta, elevando ainda mais os índices de HC no escape.

Quando o motor operava em condições de mistura pobre, numa região mais próxima à estequiométrica ($\lambda < 1,35$), qualquer tendência de elevação das emissões de HC devido à combustão mais tardia (frente de chama mais lenta), era aparentemente compensada por oxidação adicional, devido à maior oferta de oxigênio conjugada a altas temperaturas.

As espécies químicas que compõe as emissões de HC de motor a gás, foram analisadas por KAISER *et al.* (1991), e apresentaram na operação com metano puro e $\lambda \sim 1,1$, altas porcentagens de combustível metano não queimado, em torno de 95%.

Baseado nos dados de KAISER *et al.* (1991) e admitindo o desacoplamento das reações de consumo de cada espécie de hidrocarboneto (LEE ; MORLEY, 1994), pôde-se inferir que as emissões de HC do motor em estudo, operando com gás natural comercial (considerando composição média em São Paulo, no período de 1996) se reduziria a 3 espécies químicas: metano CH_4 (~ 90%) , etileno C_2H_4 e etano C_2H_6 .

Em trabalho desenvolvido por POULSEN e WALLACE (1994) com motor a gás natural, foi avaliada a influência da variação de parâmetros operacionais (rotação, razão ar-combustível, entre outros) nas emissões totais de HC - THC, e foi observado que, sob todas as condições ensaiadas, o metano predominou nas emissões THC (sempre acima de 84%). Entre as emissões de não metano - NMHC, os hidrocarbonetos C_2 (etano, eteno e acetileno) compunham as maiores frações volumétricas, que juntamente com o metano eram responsáveis por mais de 99% do THC.

Da análise da literatura constata-se que, como outros combustíveis parafínicos, o gás metano oxida a altas temperaturas através da abstração do hidrogênio, apresentando como produto intermediário o radical metil CH_3 , que diferentemente dos radicais primários produzidos por outros parafínicos, é particularmente difícil de oxidar. Uma vez que o metil é consumido, por oxidação ou recombinação metil-metil, as reações sequenciais oxidam rapidamente os produtos do metil até monóxido de carbono CO e água H_2O .

Compensando a relativa lentidão da oxidação do metano, nota-se que a maior relação H/C do gás natural (metano em sua maioria), em relação a outros combustíveis, facilita a rápida difusão do combustível vindo das frestas, resultando que grande parte deste se oxide nos gases a mais altas temperaturas.

Em trabalho de LEE e MORLEY (1994) foi apresentado um modelo de pós oxidação de HC em motores a gasolina, adotando mecanismo detalhado de cinética química, com simplificações dos fenômenos físicos envolvidos. Os autores concluíram que a inclusão da cinética química dos óxidos de nitrogênio NO_x seria altamente recomendável, devido à grande influência inibidora dessas reações para a concentração dos radicais OH, durante as fases de expansão e exaustão, uma vez que este radical também reage com óxido nítrico NO, fornecendo dióxido de nitrogênio NO_2 e H_2O . Sendo assim, a concentração de radicais OH nos produtos da combustão principal seria dependente da concentração de NO_x dentro do cilindro, constituindo uma conexão entre as emissões dos dois tipos de poluentes.

ENG *et al.* (1997b) retomaram estas considerações e investigaram o acoplamento dos mecanismos de formação de HC e NO_x , através da análise do efeito da adição de NO no sistema de admissão e variação da emissão de HC em motor de ignição por centelha. O fato de que não foi observada nenhuma correlação estatística entre os dois fatos, pareceu indicar que a maior parte do consumo de HC deva ocorrer a temperaturas elevadas (acima de 1500 K), situação na qual aparentemente inexistente interação entre o radical OH e o NO. Neste intervalo de temperaturas, a interação entre os processos de formação de HC e NO_x parece ser causada apenas por mecanismos térmicos, ou seja, pela redução da temperatura máxima dos gases queimados.

3.3 Emissão de Poluentes e Combustão em Motores a Gás Natural

Resultados de ensaios mostram uma redução das emissões totais de hidrocarbonetos em motores a gás natural para aproximadamente 50% a 30% daquelas apresentadas por motores a gasolina. Adicionalmente, como o metano é o principal constituinte das emissões de hidrocarbonetos, quando da operação com gás natural, e sendo ele um componente parafínico, e portanto não-reativo, quando se substitui a gasolina pelo gás natural, ocorre uma redução de emissões de hidrocarbonetos reativos de cerca de 90% (SHARP *et al.*, 1993).

Esta dramática redução pode ser parcialmente explicada pelo fato das gasolinas atuais serem ricas em hidrocarbonetos reativos (olefinas e aromáticos), compostos que as refinarias vêm utilizando para assegurar o poder antidetonante necessário, após a restrição ao uso do chumbo tetraetila (DURBIN, 1989).

Os conceitos de combustão em motores a gás, que mais eficientemente têm atendido às condicionantes ambientais, se referem à utilização do processo de queima pobre (*lean burn*) ou ao uso de mistura estequiométrica. O efeito do emprego de ambos os conceitos nas emissões de HC , NO_x e CO foram esquematizados em gráfico, aqui reproduzido (figura 3.7), constante no trabalho de CARTELLIERI *et al.* (1994).

Na operação com misturas pobres, tem-se como consequência a redução das temperaturas de combustão e, portanto, das emissões de NO_x ; entretanto a diluição da mistura combustível afeta a velocidade da propagação da chama e a estabilidade de funcionamento numa ampla faixa, com conseqüente aumento significativo das emissões de HC (MENDIS *et al.*, 1993), sendo necessário, neste caso, o emprego de tecnologia de combustão rápida. Com maiores velocidades de queima e misturas pobres, pode-se

partir para a utilização de razões de compressão mais elevadas, sem a ocorrência de auto-ignição, o que pode também contribuir para um aumento do rendimento térmico. E a sobrealimentação soluciona o problema de queda de potência verificada na alternativa de queima pobre.

A redução das emissões de HC e CO, aos níveis necessários para satisfazer a legislação, é garantida por um catalisador de oxidação.

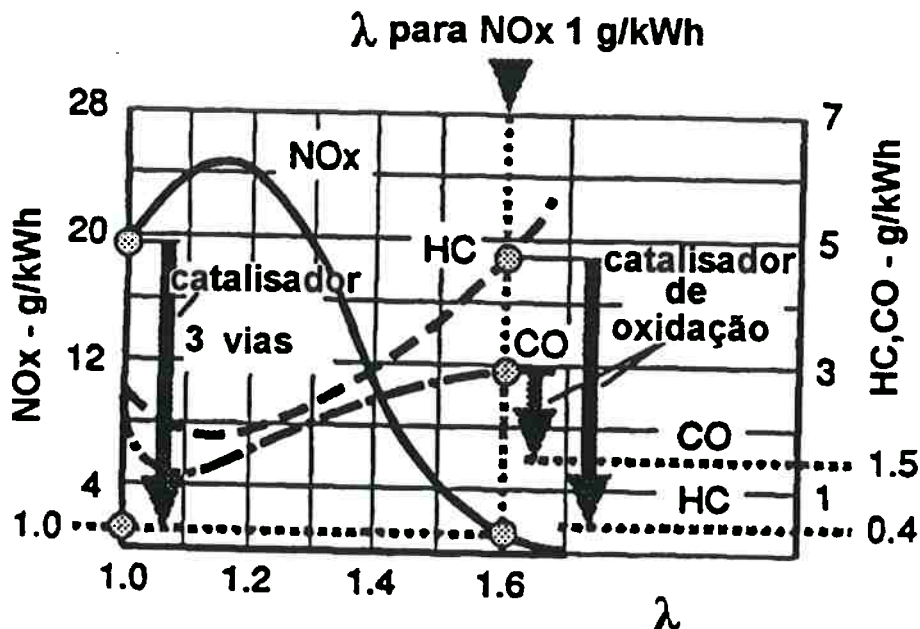


Fig. 3.7 Efeito da razão ar-combustível relativa λ nas emissões de motor a gás (CARTELLIERI *et al.*, 1994).

Na solução do uso de mistura estequiométrica, a redução das emissões a níveis compatíveis com a legislação é assegurada pelo catalisador de três vias, empregando sistema eletrônico de controle da mistura, utilizando uma sonda lambda e realimentação (HOLLNAGEL, 1995).

Para melhorar o rendimento térmico, reduzir a temperatura de elementos críticos do motor, controlar a detonação, e reduzir as emissões de NO_x, uma solução é a diluição da mistura combustível pela recirculação de parte dos gases de escapamento, o que permitiria ainda, a elevação da taxa de compressão.

Em trabalhos de JOHANSSON e OLSSON (1995a ; 1995b) sobre câmaras de combustão para motores a gás, dois processos de combustão foram avaliados - mistura estequiométrica com recirculação de gases de escapamento e mistura pobre (λ até 1,8) , para razões de compressão principalmente na faixa de 12:1, mas atingindo 16:1 para algumas geometrias de câmaras de combustão. Concluiu-se que o processo que se baseia em mistura estequiométrica permitiu atingir menores níveis de emissões às custas de um menor rendimento térmico. Para este processo, as câmaras que induziam a menores velocidade de propagação da chama levaram vantagem. Para o processo baseado em mistura pobre, câmaras associadas a velocidades intermediárias levaram vantagem.

A aplicação prática de um ou outro processo parece estar ligada diretamente ao nível máximo permissível de emissões de HC, e se esse nível inclui ou não o metano como poluente.

Estudo comparativo entre as duas tecnologias, apresentado em artigo de CORBO *et al.* (1995), observou que as emissões totais de HC para o motor operando com mistura pobre ultrapassaram os limites da legislação europeia, onde se limita o THC (*total hydrocarbons*), e portanto, a escolha recairia sobre a alternativa que emprega mistura estequiométrica, uma vez que o metano resiste bastante à oxidação no catalisador.

No entanto, por ser o metano o principal componente nas emissões de HC, o potencial de reatividade para formação de ozônio é muito baixo, e a alternativa baseada no uso de

mistura pobre parece mais atrativa para o mercado norte-americano, onde se limita o NMHC (*non-methane hydrocarbons*) que são os gases mais pesados e reativos que o metano, sendo considerados os maiores contribuintes na formação do efeito estufa (HOCHHAUSER *et al.*, 1995).

No Brasil, embora a legislação ainda não considere o metano separadamente dos outros hidrocarbonetos para efeitos de emissões, a solução baseada no uso de mistura pobre parece ser suficiente para atender os limites vigentes.

No estudo da redução das emissões poluentes, e tecnologias de combustão empregadas, cabe ressaltar a importância da variação da composição do gás combustível. E, uma das primeiras referências técnicas tratando amplamente o assunto, se encontra no trabalho de SCHAUB *et al.* (1985), relacionado a motores de cilindros maiores e baixa rotação, onde o problema de baixo número metano, que mede a resistência à detonação, é mais crítico.

KLIMSTRA (1986) publicou um trabalho analisando a intercambialidade dos combustíveis gasosos. Foi feita referência à importância do índice de Wobbe (densidade energética do combustível) no estudo dos combustíveis gasosos para motores. Pesquisas recentes de *University of Osaka* (KADOTA *et al.*, 1995) e de *Institute of Gas Technology* (SCHAEDEL *et al.*, 1997) ressaltaram a importância da composição do gás natural nos parâmetros de combustão no motor. E os pesquisadores BOSCHAN *et al.* (1989) analisaram o efeito da variação do índice de Wobbe sobre os níveis de emissão de poluentes em motores.

Os trabalhos colocaram em relevância que uma adequada inflamabilidade, uma aceitável velocidade de combustão, elevada resistência à detonação expressa pelo número metano e o conteúdo energético da mistura são pré-requisitos para um bom

desempenho dos motores. O propano e o butano têm resistência à detonação bem menor do que o metano, aspecto importante para motores de alta taxa de compressão. Variações na composição do combustível também afetaram diretamente o período de atraso de ignição, o que por seu turno alterou o início do processo da combustão.

Pesquisa de *Gas Research Institute* (LISS ; THRASHER , 1991) chamou a atenção para a necessidade de se compreender as propriedades físico-químicas do gás natural e as conseqüências da variação de sua composição. Concluiu que a variação da composição do gás natural, alterando a relação ar-combustível e o número metano, é um desafio para o controle do desempenho e emissão de poluentes do motor. RYAN e CALLAHAN (1991) alertaram para a necessidade de se manter constante a relação ar-combustível e o uso de sistemas eletrônicos de injeção, quando o objetivo é manter baixos índices de emissões.

Relato de ampla pesquisa realizada pelo programa norte-americano AQIRP *Auto/Oil Air Quality Improvement Research Program*, envolvendo indústrias automobilísticas e petrolíferas, apresentou e discutiu a forte correlação entre a composição do gás natural e as emissões de metano e de hidrocarbonetos não metano NMHC nos gases de exaustão de veículos de passageiros e de carga (HOCHHAUSER *et al.*, 1995).

O dado básico de caracterização do gás combustível é a análise, por cromatografia gasosa, de sua composição química, i.e. determinação da concentração dos compostos de hidrocarbonetos, assim como de gases inertes como nitrogênio e dióxido de carbono. Porém, sob o ponto de vista de acompanhamento da qualidade e adequação do gás natural veicular, as principais propriedades físico-químicas, cujas variações influenciam mais diretamente a operação dos motores, são seu conteúdo energético - poder calorífico volumétrico e densidade - e a resistência à auto-ignição ou detonação.

A utilização eficiente do gás natural em motores está ligada diretamente à possibilidade de emprego de elevadas taxas de compressão, limitada pela característica anti-detonante do combustível.

O poder calorífico expressa a densidade energética do combustível gasoso nas condições normais de temperatura e pressão. O índice ou número de Wobbe igualmente expressa a densidade energética do combustível gasoso, porém referido a uma condição padrão que considere variações de densidade relativa, de modo a incluir seu efeito no fluxo de gás através de restrições no escoamento (orifícios).

Uma medida tradicionalmente aceita de resistência à detonação de um combustível é seu número octano, avaliado por método ASTM (1991), através de comparação com misturas de dois combustíveis-padrão de referência, o normal heptano (valor 0) e o isooctano (valor 100). Em trabalho conjunto de pesquisa de *Southwest Research Institute e Gas Research Institute* (KUBESH *et al.*, 1992) foi proposta uma correlação entre o número octano motor e a relação hidrogênio/carbono reativos do gás.

Entretanto, este parâmetro se mostrou inadequado para o gás natural, porque este combustível apresenta valores de número octano da mesma ordem do limite superior desta escala. Por este motivo, desenvolveu-se o número metano que se presta ao mesmo propósito, utilizando porém o hidrogênio e o metano puro como referências (LEIKER *et al.*, 1972).

Com o objetivo de se elaborar uma avaliação quantitativa das variações regionais e sazonais da qualidade do gás natural distribuído nas regiões metropolitanas de São Paulo e do Rio de Janeiro - estes centros urbanos respondem por 95% do consumo veicular nacional, foi realizado levantamento diário da composição do gás natural

distribuído em ambas regiões, que resultaram em cerca de 2.200 amostras num período de 5 anos, entre 1992 e 1996 (SILVA ; ZULAUF, 1997).

A partir dos dados de composição do gás, foram calculadas, e apresentadas no trabalho, as propriedades físico-químicas que mais afetam a operação dos motores: poder calorífico superior, número de Wobbe, número metano e número octano. O conjunto de todos estes valores foi lançado em um banco de dados para permitir uma análise estatística das composições e das respectivas propriedades calculadas, de modo a se ter um quadro das misturas gasosas mais representativas do gás natural utilizado em motores no Brasil.

Como decorrência, este levantamento forneceu subsídios para definição das misturas gasosas combustíveis que foram ensaiadas e que forneceram dados experimentais para a validação do modelo, aqui desenvolvido, de formação e emissão de hidrocarbonetos em motores a gás.

3.4 Simulação Termodinâmica do Ciclo de Trabalho em Motores

3.4.1 Modelagem do processo de combustão

Dentre as várias classificações de modelos de combustão citadas na literatura, aquela que tem maior aceitação, sendo utilizada por muitos autores, divide os modelos de combustão em 3 categorias: modelos zero-dimensionais, quase-dimensionais e multi-dimensionais.

Os modelos zero-dimensionais e os quase-dimensionais, também chamados fenomenológicos, são construídos admitindo-se que processos independentes ocorrem durante um ciclo de trabalho do motor, como por exemplo: injeção de combustível,

mistura ar-combustível, combustão, transferência de calor, escoamento de gases. Ou seja, estes modelos são agregados de sub-modelos, nos quais são empregadas equações simplificadas ou relações empíricas.

A modelagem zero-dimensional, tendo o tempo como única variável independente, usualmente se refere a uma análise termodinâmica do ciclo de trabalho do motor, na qual a evolução do processo de combustão é especificada como um dado de entrada ou uma simples correlação empírica. Várias referências, dentre elas ALKIDAS (1986); CHEUNG e HEYWOOD (1993), fornecem alguns exemplos de modelagem zero-dimensional.

Nos modelos quase-dimensionais utiliza-se adicionalmente um submodelo de combustão turbulenta, com o objetivo de se prever o atraso de inflamação e a evolução da combustão, representados em função dos parâmetros de operação e de projeto do motor. Neste tipo de modelo, os gases no interior do cilindro são subdivididos em duas zonas: dos gases queimados (produtos da combustão) e dos gases ainda não queimados, além de ser considerada a velocidade de propagação da frente de chama no interior da câmara de combustão. Devido a estas características, os modelos quase-dimensionais são muito empregados no estudo de emissões - formação de NO_x , HC não queimado e particulados.

Os modelos multi-dimensionais são baseados na solução numérica de sistemas de equações diferenciais parciais, que representam o balanço mássico, energético (energia térmica e energia de turbulência) e de quantidade de movimento para a mistura ar-combustível no cilindro do motor, além da conservação das espécies químicas envolvidas. Com a escolha adequada das condições de contorno, estes modelos fornecem ambas soluções (espacial e temporal) das variáveis de interesse.

Em princípio, os modelos multi-dimensionais têm a capacidade de prever em detalhes o escoamento do fluido dentro do cilindro e a razão da propagação e forma geométrica da frente de chama. Tais modelos, entretanto, requerem um grande tempo computacional para a simulação de todo o ciclo de trabalho, resultante da complexidade de sua formulação, além de apresentarem a necessidade de um grande número de dados confiáveis, assim como de sofisticados ensaios experimentais para a validação do modelo. Programas computacionais multi-dimensionais disponíveis no mercado, como KIVA e FIRE, entre outros, apresentam o inconveniente de necessitarem um longo período de ajuste do código computacional ao problema específico a ser resolvido (TINAUT *et al.*, 1999). Exemplos de modelagem multi-dimensional se encontram nas pesquisas de GOSMAN *et al.* (1985), BARITAUD *et al.* (1996) e ANGELBERGER *et al.* (1997).

Considerado uma referência na área, trabalho elaborado por KRIEGER e BORMAN (1966) apresentou em detalhes modelagem termodinâmica, partindo do diagrama pressão x volume, medido em várias condições de operação, para motores Otto (modelagem da combustão em duas zonas: mistura ar-combustível não queimada e gases queimados) e para motores Diesel (distribuição uniforme de gases no cilindro). Estes modelos foram baseados em equacionamentos semi-empíricos, envolvendo a análise termodinâmica do sistema, os fenômenos de transferência de calor convectiva, as perdas de gases por vazamento durante o tempo de compressão e a dissociação dos gases queimados, além da consideração de outros parâmetros que deviam ser estimados.

Já na década de 70, outros autores ampliaram o modelo de KRIEGER e BORMAN, acrescentando cálculos que levaram em conta a geometria da frente de chama e

velocidade turbulenta de queima (LANCASTER *et al.*, 1976) e incluindo os efeitos da geometria da câmara de combustão (MATTAVI *et al.*, 1980). Neste caso, a modelagem para motores Otto pode ser considerada quase-dimensional, já que considera a propagação da frente de chama na câmara de combustão.

POULOS e HEYWOOD (1983) desenvolveram simulação computacional de motores ciclo Otto, muito citada na literatura, empregando modelo de propagação de chama turbulenta de combustão, que foi primeiramente postulado por BLIZARD e KECK (1974), e posteriormente estendido por TABACZYNSKI (1977). HIRES *et al.* (1978) reformularam o modelo de TABACZYNSKI, para contemplar variações de geometria da câmara de combustão.

Neste modelo, o campo de escoamento turbulento na câmara de combustão é admitido isotrópico e homogêneo. No início da combustão são dados valores de intensidade de turbulência e macro escala de comprimento (admitida como sendo o volume instantâneo do cilindro dividido pela área do pistão), fornecidos por um modelo de turbulência desenvolvido por MANSOURI (1982).

Este modelo zero-dimensional de propagação da chama turbulenta foi fundamentado na seguinte transformação de energia em cascata: a energia cinética do escoamento médio é fornecida ao cilindro pelas válvulas; essa energia cinética é transformada em energia cinética de turbulência através da dissipação turbulenta; a energia cinética da turbulência é convertida em energia interna através da dissipação viscosa. Quando a massa escoar para fora do cilindro, ela carrega consigo tanto a energia cinética do escoamento médio como da turbulência.

Quando a combustão se inicia, e os gases não queimados são rapidamente comprimidos pela chama, admite-se conservação da quantidade de movimento angular dos vórtices, o

que permite calcular os valores de escala de comprimento (ou macro escala de turbulência) e de intensidade de turbulência.

A combustão, representada pelo modelo termodinâmico mostrado na figura 3.8, é simulada por dois processos simultâneos.

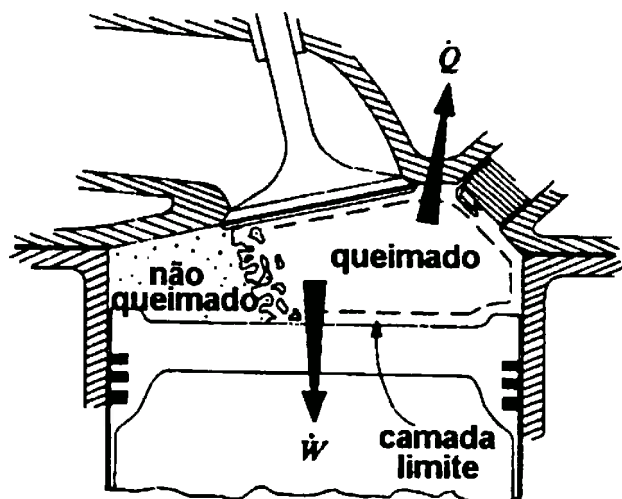


Fig. 3.8 Modelo termodinâmico de combustão quase-dimensional (3 zonas)
(HEYWOOD, 1988).

No primeiro processo, uma porção de mistura não queimada penetra na frente de chama, com uma velocidade que é modelada como a soma de um termo convectivo (intensidade de turbulência) e um termo difusivo (velocidade de propagação da chama laminar). A velocidade da chama laminar é obtida a partir de correlações experimentais para diferentes combustíveis, relações ar-combustível, e frações de gases queimados.

No segundo processo do mecanismo da combustão, ocorre a queima dos elementos de mistura combustível dentro da chama. Essa pós-queima, que acontece na micro escala

de Taylor , se processa com a velocidade da chama laminar, pois a difusão é admitida como laminar nessa escala (YOSHIDA *et al.*, 1997).

Note-se que, com os dois processos do mecanismo de combustão ocorrendo simultaneamente, a razão de queima é limitada tanto pela capacidade da frente de chama de engolfar mistura não queimada, como pelo tempo necessário para a subsequente pós-queima.

Para simular a combustão com o modelo apresentado, é necessário, para cada posição do virabrequim, determinar geometricamente as características da frente de chama em função de seu raio.

3.4.2 Transferência de calor em motores

Solucionar os problemas de transferência de calor em motores de combustão interna é considerada uma das tarefas mais complexas, pois observa-se uma grande variação de ciclo a ciclo dos valores e do comportamento da troca de calor; a razão de transferência de calor varia substancialmente também espacialmente, uma vez que os gases de combustão estão submetidos a movimentos transientes, turbulentos, tri-dimensionais com grandes variações de pressão e temperatura.

Entretanto, deve-se reforçar a idéia que modelos termodinâmicos zero-dimensionais, ou quase-dimensionais, não pretendem descrever em detalhes os efeitos locais e transitórios dos processos de transferência de calor em motores, uma vez que tais modelos assumem a hipótese de regime permanente em seu equacionamento e homogeneidade da mistura combustível no interior da câmara de combustão. Nestes

casos, são adotados modelos fenomenológicos de troca de calor, envolvendo constantes empíricas específicas, que requerem ajustagem contra dados experimentais.

E como as formulações propostas e suas constantes empíricas são baseadas em experimentos específicos, é fundamental conhecer o campo de validade (tipo de motor, condições de operação) do equacionamento que define o coeficiente global - convecção e radiação - de transferência de calor em motores, para corretamente aplicá-lo.

Na modelagem do coeficiente convectivo instantâneo h , diversos autores como WOSCHNI (1965) e ANNAND ; MA (1971) empregaram correlações empíricas envolvendo os números de Nusselt Nu - referente ao coeficiente de transferência de calor, Prandtl Pr - razão entre troca térmica e difusão molecular (considerada constante para gás) e Reynolds Re - expressão zero-dimensional da velocidade de escoamento - na forma da eq. 3.1, a partir de semelhança física entre a transferência de calor em motores e através de tubos em fluxo turbulento. Já HEYWOOD (1988) chegou à mesma expressão a partir de análise dimensional.

$$Nu = a Re^m Pr^n \quad (3.1),$$

onde os coeficientes a , m e n são obtidos através de correlações empíricas, usando resultados experimentais para escoamento turbulento.

Aplicando as definições de Nu e Re , substituindo a densidade pela aplicação da equação de estado e considerando a viscosidade e a condutividade como função da temperatura, a eq. 3.1 toma a forma da eq. 3.2 :

$$h = C D^{m-1} p^m T^{(0,75-1,62m)} w^m \quad (3.2);$$

sendo :

D : diâmetro do cilindro, considerado como o comprimento específico;

P : pressão instantânea dos gases, em equilíbrio, na câmara de combustão;

T : temperatura instantânea dos gases, calculada a partir da equação de estado;

w : velocidade característica do escoamento, composta pelos efeitos de movimento do pistão, turbilhonamento induzido e combustão;

C : coeficiente de ajuste.

WOSCHNI (1967) desenvolveu um equacionamento semi-empírico para o ciclo de trabalho de motores Diesel, propondo para o coeficiente instantâneo de transferência de calor a relação:

$$h = 3,26 D^{-0,2} P^{0,8} T^{-0,55} w^{0,8} \quad (3.3).$$

WOSCHNI não ignorava o papel que a radiação poderia exercer no cálculo da transferência total de calor em motores, mas considerava sua influência muito reduzida e já contemplada, implicitamente, na adoção dos valores das constantes empíricas referentes à velocidade característica do escoamento.

Um pouco mais tarde, WOSCHNI (1981) realizou pesquisa comprovando que, apesar dos mecanismos de transferência de calor em motores Otto (ignição por centelha) serem bem diversos daqueles que ocorrem em motores Diesel, sua formulação proposta poderia ser estendida também a estes.

HOHENBERG (1980) analisou o equacionamento de WOSCHNI e propôs algumas modificações, baseadas em experimentos empregando técnicas de medições de temperatura da parede, fluxo de calor e pressão de combustão mais acuradas.

A formulação proposta por HOHENBERG para o coeficiente instantâneo de transferência de calor em motores Diesel foi apresentada da seguinte forma:

$$h = C_1 V_c^{-0,06} T^{-0,04} (C_m + C_2)^{0,8} \quad (3.4),$$

sendo V_c o volume instantâneo do cilindro e C_m a velocidade média do pistão.

Através de experimentos realizados em diversos motores Diesel de injeção direta, HOHENBERG concluiu que com uma margem de erro de $\pm 10\%$, a expressão do coeficiente h (eq. 3.4) era satisfatoriamente ajustada com os valores:

$$C_1 = 130 \quad ; \quad C_2 = 1,4 .$$

Deve-se fazer a ressalva que ao se variar as condições de turbulência e forma geométrica da câmara de combustão, por exemplo, faz-se necessária uma nova determinação experimental para os valores das constantes C_1 e C_2 .

Apesar do modelo de WOSCHNI possuir o inconveniente de apresentar uma descontinuidade entre os processos de alta pressão - compressão e expansão - e troca de gases - admissão e escapamento, pois as constantes empíricas envolvidas assumem valores diversos, trata-se de uma correlação simples e exaustivamente empregada em modelagem termodinâmica, inclusive referente a motores de ignição por centelha. Além disso, traz implicitamente o efeito da radiação e explicita a influência do tamanho do motor, da pressão e temperatura instantâneas, sendo que a velocidade característica considerada depende não só da velocidade média do pistão, mas também do aumento da turbulência causada pela combustão.

Trabalho conjunto apresentado por WOSCHNI, HOHENBERG e seus colaboradores (BARGENDE *et al.*, 1991) propôs nova formulação para o cálculo do coeficiente

instantâneo de transferência de calor, de modo a levar em conta a característica de variação temporal deste coeficiente, durante o ciclo de trabalho do motor.

Os autores observaram que, tanto a formulação proposta por WOSCHNI como aquela de HOHENBERG, apresentaram boa correlação com resultados experimentais de troca de calor integral no ciclo, porém não descreviam a característica de evolução no tempo do coeficiente de transferência de calor. Partindo desta constatação, revisaram suas formulações considerando efeitos de variação de energia cinética e propagação de frente de chama para o cálculo do coeficiente h , partindo de medições instantâneas do fluxo de calor e temperatura na parede da câmara de combustão.

No trabalho de SHAYLER *et al.* (1995), foi desenvolvida uma correlação simplificada entre a variação da transferência de calor e parâmetros geométricos e operacionais de motor de ignição por centelha; foi empregado equacionamento de WOSCHNI, escolhido por ser o que mais se ajustou a experimentos conduzidos pelos autores. A correlação empírica proposta no trabalho foi considerada válida tanto para condições de operação em regime permanente, como para transitórios.

Recentemente, HAN *et al.* (1997) compararam proposições de diversos autores com resultados experimentais (figura 3.9) e chegaram à conclusão semelhante de BARGENDE *et al.* (1991), ou seja, que apesar dos valores médios no ciclo dos diversos coeficientes empíricos apresentarem boa correlação com dados experimentais, os valores instantâneos, isto é, sua evolução durante o ciclo, não representaram os experimentos.

Na elaboração de sua formulação, os autores assumiram hipóteses adotadas por WOSCHNI, porém reforçando a dificuldade de se empregar seu modelo sem modificações. As constantes empíricas propostas levaram à uma boa correlação

experimental da evolução da transferência de calor durante a combustão, melhor do que no período de troca de gases.

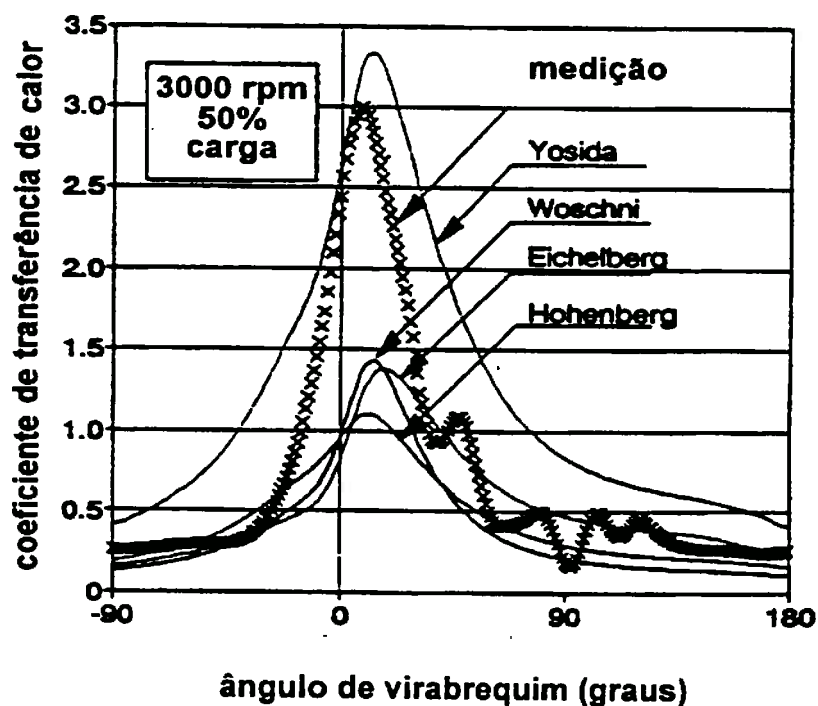


Fig. 3.9 Comparação entre coeficientes empíricos de transferência de calor, propostos por diversos autores, e dados experimentais (HAN *et al.*, 1997).

Os resultados foram considerados satisfatórios, levando-se em conta que a troca de calor ocorre predominantemente durante a fase de combustão (BOHAC *et al.*, 1996) e deve ser modelada predominantemente para os fenômenos envolvidos nesta fase.

GUEZENNEC e HAMAMA (1999) também empregaram a formulação de WOSCHNI na análise termodinâmica de motores Otto de injeção direta, porém reforçando a idéia da necessidade de ajuste, para cada tipo de motor, das constantes empíricas envolvidas no equacionamento.

4. ATIVIDADES EXPERIMENTAIS

4.1 Preparação dos Ensaios

4.1.1 Infraestrutura laboratorial

Os ensaios do motor a gás foram realizados utilizando-se a infraestrutura do Laboratório de Motores do IPT - Instituto de Pesquisas Tecnológicas. A seguir são apresentados parâmetros técnicos dos principais equipamentos utilizados.

Bancada de análise de emissões gasosas da marca Horiba - HDD Bench, para bancada dinamométrica de motores pesados. Na figura 4.1, pode-se ver a bancada de análise de gases, com analisadores de HC modelo FIA-236 (ionização de chama), de CO e CO₂ modelo AIA-210 (infravermelho não dispersivo), de NO_x modelo CLA-220 (luminescência química) e de O₂ modelo MPA-220 (magneto-pneumático), assim como os fornos e linhas de coleta e condicionamento de amostras dos gases de escapamento dos motores, colocados junto ao dinamômetro (figura 4.2). Complementando o sistema, tem-se a central de gases, que abriga os cilindros dos gases especiais necessários para a operação da bancada de análise de emissões - total de 33 cilindros; além dos cilindros dos gases de trabalho (ar sintético, N₂, H₂/He, O₂/Argônio), há um cilindro de gás referência para cada faixa de leitura de cada analisador; da central, os gases são transportados através de tubulação de aço inox especial para um painel de controle existente junto à bancada de análise de gases. Este painel permite, além do fechamento das linhas, o ajuste fino de pressão na entrada da bancada de análise de gases; nas figuras 4.3 e 4.4 são mostradas as vistas externa e interna da central de gases, a figura 4.5 mostra detalhe das linhas de inox e na figura 4.6 pode-se ver o painel de controle.

Sistema de aquisição de dados para bancada dinamométrica, que visa automatizar a coleta e tratamento de dados das bancadas dinamométrica e de análise de emissões gasosas. As grandezas monitoradas são: rotação, carga, temperaturas, pressões, consumo de combustível e de ar, e concentrações dos gases de escapamento. O programa gerenciador do sistema, utilizando os dados coletados e outros introduzidos manualmente (por exemplo, caracterização do motor e condições atmosféricas) efetua os cálculos necessários e gera uma planilha formatada para ser impressa contendo todas as informações do ensaio (figura 4.7).

Sistema de análise de combustão em motores, baseado na medição da pressão no cilindro em função da posição angular do virabrequim. Basicamente o sistema é composto por transdutores de pressão piezelétricos da marca Kistler, modelo 6123 A2; o sinal gerado pelo transdutor é convertido por um amplificador de carga marca AVL, modelo 3059, em sinal de tensão; gerador de sinais de posição angular marca AVL, modelo 360C/600, constituído por um transdutor óptico e um circuito multiplicador de pulsos; placa de amostragem simultânea; placa de aquisição da marca Keithley-Metrabyte, modelo DAS 58; computador e outros transdutores pertinentes, como mostra a figura 4.8. Detalhes da concepção do sistema estão no trabalho de ZABEU; FIGUEIREDO (1997).

Sistema de medição volumétrica do consumo de ar tipo “roots” da marca Dresser, modelo 56M125, que permite medições de vazão de ar até 1600 m³/h (figura 4.9). O ar fornecido ao filtro de entrada é proveniente de um sistema de ar condicionado, que controla sua temperatura e umidade, visando melhorar a repetibilidade dos ensaios.

Sistema de medição mássica do consumo de gás combustível (alta pressão), do tipo Coriolis marca Micro Motion, modelo DH012S, que permite medições de vazão de gás natural até 4 kg/min., conforme mostrado na figura 4.10. O indicador deste sensor

fornece a densidade e temperatura do gás, assim como os consumos mássicos instantâneo e acumulado.

Sistema de armazenagem e fornecimento de gás natural constituído por cestas com cilindros de alta pressão, cada cilindro possuindo capacidade de 100 litros hidráulicos, que estão apresentadas na figura 4.11 ao lado de cilindros de propano e butano. De forma a permitir uma rápida mudança da alimentação de uma cesta para outra, foi montado um conjunto de válvulas e uma linha de alta pressão (200 bar), que leva o gás até a sala de ensaio, passando pelo medidor de consumo. No interior da sala foi montado um bloco contendo manômetro, válvulas de purga e de corte rápido.

4.1.2 Preparação das misturas de gases combustíveis

Para possibilitar uma análise comparativa com os resultados de simulação, foram escolhidas duas misturas gasosas de composições bem diferentes. Uma contendo praticamente só metano, foi adquirida diretamente de empresa fornecedora de gases especiais. A outra foi preparada através de mistura de metano e etano, de pureza industrial, no próprio Laboratório de Motores.

Ambas misturas combustíveis foram analisadas por cromatografia após a preparação.

4.1.3 Preparação de motor a gás natural

Através do convênio IPT / Mercedes-Benz foi obtida a cessão, para realização de ensaios dinamométricos, de um motor Mercedes-Benz M 366 G, que é um motor a gás natural de ignição por centelha, de aspiração natural, para aplicação em ônibus urbanos.

Este motor opera com mistura ligeiramente pobre ($\lambda \sim 1,2$) e não emprega catalisador.

Suas características principais são apresentadas a tabela 4.1.

Tabela 4.1 - Especificações básicas do motor M 366 G.

Potência nominal	110 kW a 2800 rpm
Torque máximo nominal	420 Nm a 1300 rpm
Processo de combustão	4 tempos, ignição por centelha com mistura pobre homogênea e câmara de baixo "swirl"
Sistema de alimentação	válvula reguladora de pressão e misturador tipo <i>Venturi</i>
Sistema de ignição	Bosch, transistorizado, com distribuidor
Cilindrada total	6 x 993 cm ³
Razão de compressão	12:1
Curso dos pistões	133 mm
Diâmetro dos cilindros	97,5 mm
Comprimento das bielas	230 mm

Para a realização dos ensaios de emissões e desempenho no motor foi utilizada sala de ensaio com dinamômetro hidráulico, de marca Schenck, modelo D 360-1e, com capacidade máxima de carga de 1300 N, e sistema de coleta de gases de escapamento.

Para permitir o monitoramento das temperaturas do ar de admissão, gases de escape, óleo lubrificante, água de arrefecimento na entrada, na saída e na galeria do motor, o motor foi instrumentado com termopares tipo J e chave seletora. Além do motor, foram montados termopares também no medidor de consumo de ar e na sonda de coleta de gases de escapamento.

Para medir as baixas pressões foram instalados pontos de tomada de pressão imediatamente antes do venturi misturador, nos coletores de admissão e de escape e na galeria do óleo lubrificante. Estes pontos foram conectados a transdutores de pressão, marcas Transmitel modelo B1151DP e Ashcroft modelo K-1, através de tubulação flexível. Os transdutores e suas unidades de leitura foram posicionados no painel de controle da bancada dinamométrica.

Para a medição da pressão no interior do cilindro do motor foi instalado um transdutor de pressão tipo piezelétrico em um cabeçote furado especialmente com este objetivo. Esse transdutor converte o sinal de pressão no interior do cilindro em um sinal de carga elétrica que, tratado por um amplificador de carga capacitivo, permite medir a evolução da pressão no interior da câmara de combustão. Detalhe da localização deste transdutor no cabeçote pode ser visto na figura 4.12 .

De modo a garantir que, em qualquer condição de operação, a água de arrefecimento do motor mantivesse uma temperatura controlada de modo a melhorar a repetibilidade dos ensaios, o ganho e o valor de ajuste do controlador deste sistema foi fixado conforme especificação do fabricante do motor. Além do controlador, o sistema de arrefecimento é composto por trocador de calor, válvula proporcional, atuador pneumático e reservatório de expansão.

Uma sonda foi instalada na tubulação de escape para a coleta dos gases de escapamento, que têm suas concentrações de poluentes medidas pela bancada de análise de emissões. A complexidade desta instalação decorre da necessidade de garantir que a temperatura da sonda permaneça entre 70 e 200 °C em qualquer condição de operação do motor. O valor mínimo previne a condensação de hidrocarbonetos pesados, e o valor máximo corresponde à temperatura limite do material da mangueira do sistema de coleta de gases.

As figuras 4.13 a 4.15 mostram o motor instalado na bancada dinamométrica, após instalação de termopares com cabos compensados e tomadas de pressão.

A figura 4.16 apresenta uma vista da sala de controle do dinamômetro, dos equipamentos e instrumentação de ensaio.

4.2 Ensaio Dinamométricos

4.2.1 Metodologia de ensaio

Os testes com as misturas combustíveis preparadas compreenderam a realização de ensaio de emissões e de desempenho.

Os ensaios de desempenho para levantamento da curva de plena carga do motor foram feitos de acordo com a norma ABNT NBR 5484 (1985).

As medições de emissões gasosas foram feitas com base na norma ABNT NBR 10813 (1993), que estabelece que as medições sejam feitas em 13 condições (modos) de operação do motor em regime permanente, ao final foram calculadas as emissões específicas médias ponderadas de HC , CO e NO_x .

Pelo fato de ainda não existir no Brasil norma para ensaio de emissões de motores a gás, foi necessário desenvolver algumas alterações nesta norma, destinada a motores Diesel. Estas alterações dizem respeito ao cálculo dos coeficientes de conversão das concentrações dos gases em base seca para base úmida, que foram modificados levando-se em consideração a estequiometria do gás natural de composição mais frequente em São Paulo (vide item 3.3).

Imediatamente antes do início do consumo da mistura combustível e após o final do ensaio eram coletadas amostras para cromatografia e verificação da constância de sua composição durante o ensaio.

Também foram feitas aquisições de dados de pressão em três condições no ensaio de 13 modos: plena carga e 50% de carga na rotação de potência máxima; plena carga em rotação intermediária. Estes dados de evolução da pressão dentro do cilindro foram empregados em simulação computacional termodinâmica de motor a gás, recentemente desenvolvida como parte de trabalho de pesquisa do grupo de Motores - IPT (ZABEU,

1999) , e juntamente com a evolução no tempo da temperatura dos gases no cilindro (resultado de cálculos de tal análise termodinâmica) foram utilizados, como dados de entrada, na simulação computacional para estimar as emissões de HC de motores a gás.

4.2.2 Apresentação e análise dos resultados

Os ensaios de desempenho e emissões realizados com as duas misturas de gases combustíveis fazem parte de um projeto de pesquisa do IPT, relacionado ao estudo de emissões poluentes em motores a gás, no qual foram ensaiadas diversas misturas gasosas, representativas não somente das composições em torno dos valores médios, que corresponderiam ao gás típico consumido por um veículo em operação, como também de outras composições dentro de uma ampla faixa de ocorrência.

O conjunto de dados experimentais referentes a estes ensaios podem ser encontrados no trabalho de NIGRO *et al.* (1997).

Quando da seleção dos gases combustíveis usados nas simulações de emissões de hidrocarbonetos, a intenção foi explorar situações de variação extrema na composição. Deste modo poder-se-ia também avaliar a sensibilidade do modelo em relação à variação da composição do combustível.

As composições das misturas escolhidas para simulação, bem como os valores das propriedades que mais afetam a operação dos motores, se encontram na tabela 4.2.

Com relação a estas misturas combustíveis foram feitas medições de desempenho, de emissões poluentes e da evolução da pressão, ao longo do ciclo. Para o gás combustível constituído por praticamente só metano (gás A) foram feitas medição em três condições de operação – 100% e 50% de carga na rotação de potência máxima (2800 rpm, para o motor em questão) e 100% de carga em rotação intermediária, próxima do torque máximo (1680 rpm). Para se avaliar o efeito da composição do combustível na

simulação das emissões de hidrocarbonetos, procedeu-se a ensaios com a mistura de metano e etano (gás B) na condição de operação de 100% de carga na rotação de potência máxima. Pode-se assim avaliar a resposta do simulador frente a variações de rotação, carga e composição do combustível, em torno do caso base - gás metano na condição de plena potência.

Um resumo dos resultados obtidos nos ensaios é apresentado na tabela 4.3. O apêndice A traz as folhas de ensaio, bem como as curvas de pressão adquiridas referentes às condições ensaiadas das duas misturas combustíveis.

Tabela 4.2 - Composição e propriedades das misturas combustíveis simuladas.

COMPOSIÇÃO (% em volume)	GAS A	GAS B
metano	98,0	52,3
etano	0,1	46,0
propano	0,1	0,9
butano e superiores	0,1	0,3
dióxido de carbono	0,0	0,1
nitrogênio	1,7	0,4
CONTEUDO ENERGÉTICO (MJ/Nm³)		
número de Wobbe	49,4	57,4
poder calorífico superior	37,2	51,2
RESISTÊNCIA A DETONAÇÃO		
número Metano	97,3	53,0
número Octano	138	106

Tabela 4.3 - Resumo dos resultados de ensaios.

	GAS A			GAS B
rotação (rpm)	2800	2800	1680	2800
potência observada (kW)	88	44	66	110
razão ar-combustível relativa	1.28	1.28	1.29	1.07
vazão de combustível (kg/h)	18,9	11,5	15,1	23,1
vazão de ar úmido (kg/h)	406,8	248,3	322,0	406,7
vazão de CH ₄ no escape (kg/h)	0,138	0,102	0,107	0,038
relação emissão CH ₄ /admissão de combustível (% em massa)	0,73	0,89	0,71	0,16
emissão específica de CH ₄ (g/kW.h)	2,7			0.4
emissão específica de HC total (g/kW.h)	3,6			1.3

Da análise das tabelas 4.2 e 4.3 pode-se inferir que o aumento do número de Wobbe propiciou elevação da potência do motor e decréscimo das emissões de metano (CH₄) e de hidrocarbonetos totais (HC total), devido a um enriquecimento da mistura, confirmando que o motor está operando em regime de mistura pobre.

Observa-se que para motores operando com mistura pobre e sistema de dosagem de gás combustível sem realimentação do teor de oxigênio no escapamento (*open loop*), caso do motor utilizado nos ensaios, a razão ar-combustível efetiva é afetada diretamente pelo número de Wobbe, influenciando a combustão e, conseqüentemente o desempenho do motor e as emissões de hidrocarbonetos.

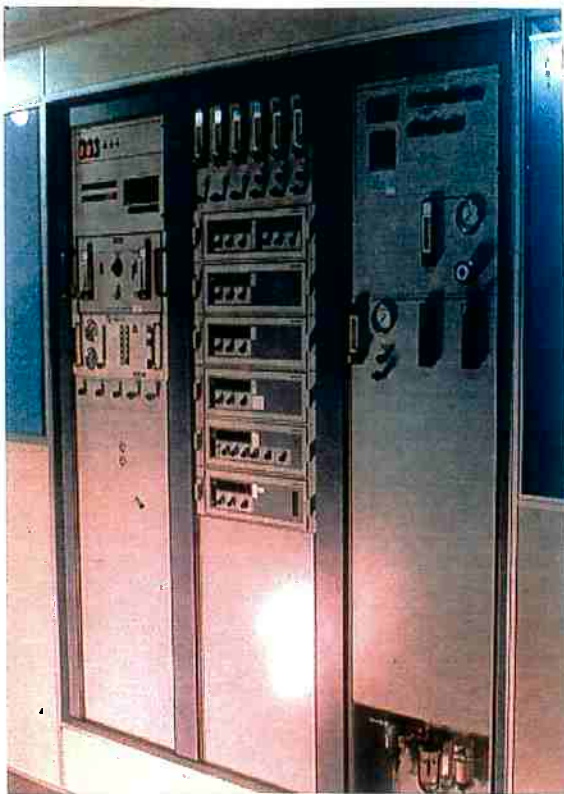


Fig. 4.1 – Bancada de análise de gases de exaustão.



Fig. 4.2 – Sistema de coleta de amostras.



Figs. 4.3 e 4.4 – Vistas externa e interna da central de gases.



Fig. 4.5 – Detalhe das linhas de gases para bancada de análise.



Fig. 4.6 – Painel de ajuste de pressão de gases.



Fig. 4.7 – Sistema de aquisição de dados de baixa taxa de amostragem.

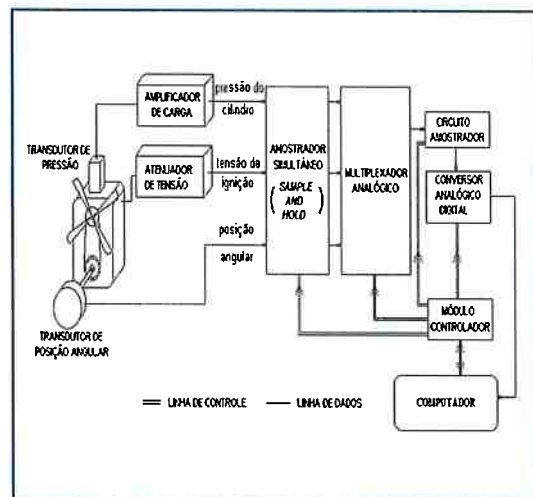


Fig. 4.8 – Sistema de análise de combustão em motores.

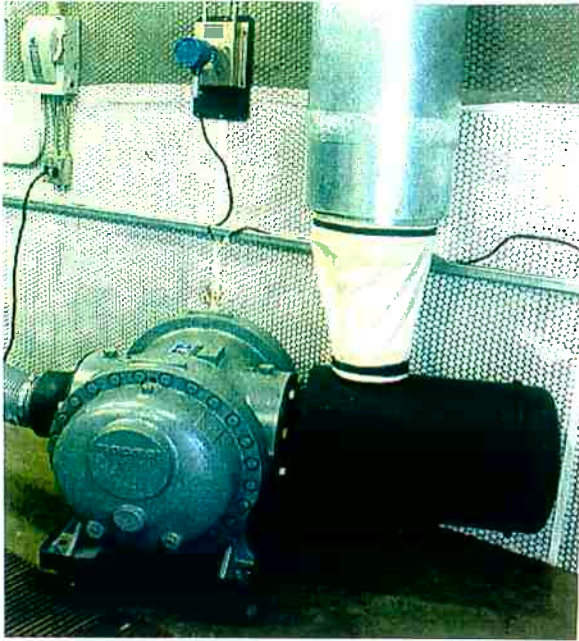


Fig. 4.9 – Detalhe do sistema de medição do consumo de ar de admissão.



Fig. 4.10 – Medidor mássico de gás combustível, instalado na área de preparação de motores.

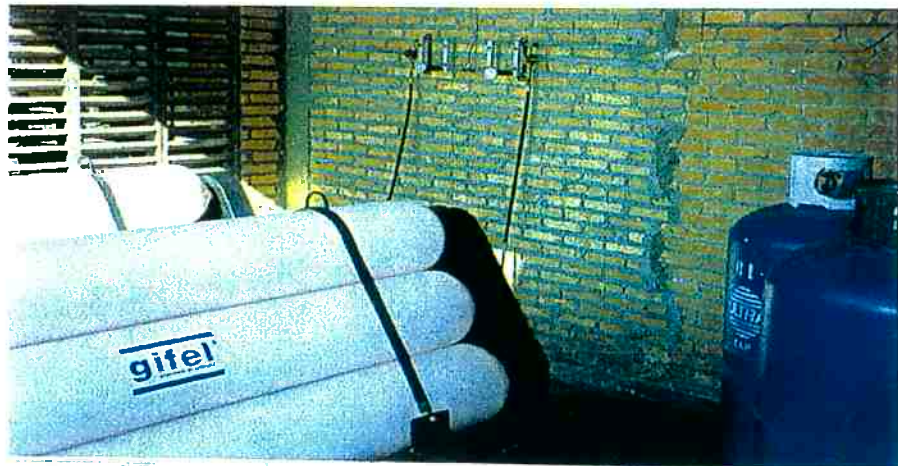


Fig. 4.11 – Sala de combustíveis, com detalhes do sistema de purga e distribuição de gás para as salas dinamométricas, das cestas de gás natural e de cilindros de propano e butano para preparação de misturas.

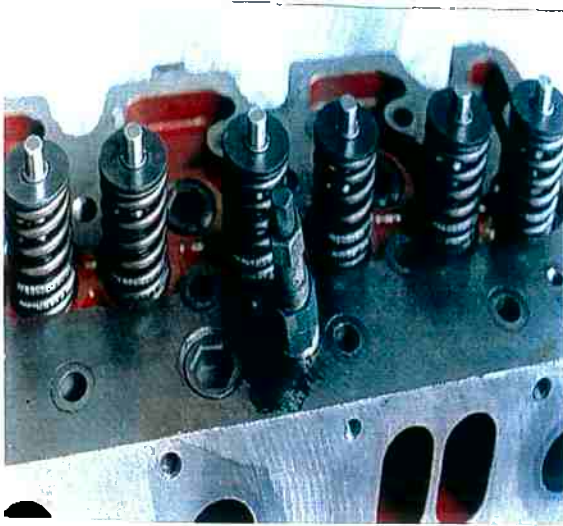


Fig. 4.12 – Detalhe da localização do transdutor de pressão instalado no cabeçote.

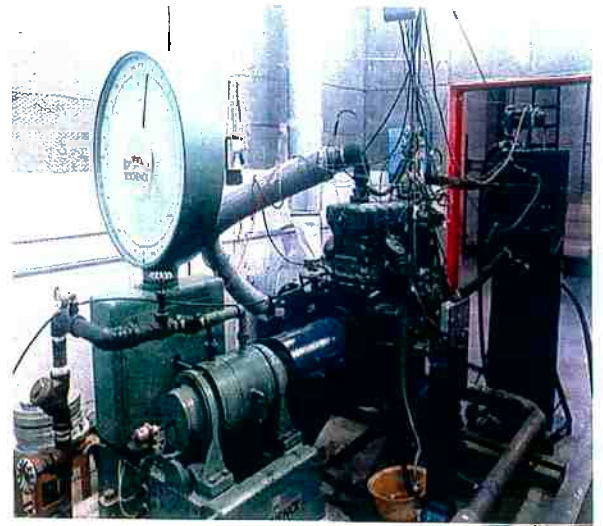


Fig. 4.13 – Motor instrumentado, montado na bancada dinamométrica.

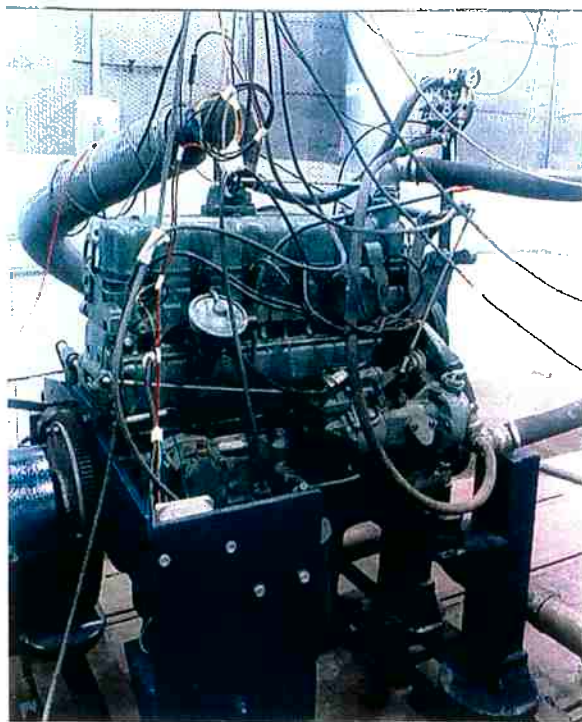


Fig. 4.14 – Motor instrumentado.



Fig. 4.15 – Sala de dinamômetro com sistema de ar condicionado.



Fig. 4.16 – Sala de controle do dinamômetro, dos equipamentos e instrumentação de ensaio.

5. MODELO DA FORMAÇÃO E EMISSÃO DE HIDROCARBONETOS EM MOTORES A GÁS

5.1 Premissas do Modelo

Com o objetivo de compreender os fatores que controlam o processo de formação e emissão de hidrocarbonetos em motores a gás, foi elaborado um modelo unidimensional de difusão turbulenta e reação, transiente, para simular a pós oxidação que ocorre na camada limite reativa entre a mistura de ar e combustível não-queimado emergente das frestas frias da câmara de combustão, e os gases quentes no cilindro, produtos da combustão principal.

Foi considerada como boa aproximação para motor a gás natural (motor utilizado na verificação experimental do modelo), a adoção do mecanismo de retorno ao cilindro, após a passagem da frente de chama, da mistura combustível proveniente das regiões de frestas, como o único processo pelo qual hidrocarbonetos não queimados estão presentes no cilindro, durante o curso de expansão.

Por contribuírem de modo preponderante no mecanismo de frestas, foram considerados como responsáveis pela retenção de HC nas fases de compressão e combustão, os volumes compreendidos entre o topo do pistão e as paredes do cilindro, logo acima do primeiro anel, assim como a região atrás e acima do primeiro anel (fundo do canaleta). Trabalhou-se com a hipótese de que estas frestas poderiam ter seus efeitos considerados em conjunto, constituindo um único volume, determinado através de medições e cálculos "a quente", para se levar em conta a expansão térmica.

Os gases provenientes das frestas foram admitidos como sendo compostos apenas por mistura combustível não queimada; hipótese plenamente justificada pela geometria do motor em estudo - câmara de combustão no pistão e vela de ignição centrada.

Desprezando restrições ao fluxo de gases entre a câmara de combustão e a região de frestas, e não considerando as forças dinâmicas dos anéis dentro dos canaletos (durante a expansão o primeiro anel se mantém apoiado na face inferior), a pressão reinante nesta última, admitida como espacialmente uniforme, ficou imposta pela evolução da pressão de equilíbrio durante o ciclo de trabalho do motor (valores medidos).

O modelo admitiu inicialmente uma camada limite de mistura ar-combustível adjacente às paredes impermeáveis do cilindro, estando estas a uma temperatura constante, conhecida (média entre as temperaturas do pistão, anéis e superfícies do cilindro). Tal camada limite foi considerada como formada a partir do escoamento, modelado como um jato junto à parede, de gases emergentes das regiões de frestas, e levando em conta sua expansão, decorrente da descompressão causada pelo movimento descendente do pistão.

O desenvolvimento espacial desta camada limite foi representado como resultado da evolução no tempo dos campos de velocidade axial – fluxo de saída das frestas, e da velocidade transversal dentro da camada limite, na direção radial do cilindro. Considerou-se, portanto, o transporte de massa na direção axial do cilindro, entre as seções transversais.

Com o intuito de se estruturar o processo de forma unidimensional, sem perder as informações resultantes do desenvolvimento da camada limite a partir do jato das frestas, esta foi modelada como resultante de dois processos simultâneos – o desenvolvimento unidimensional de camada limite apenas pela ação de expansão desta, na direção normal à parede do cilindro, em decorrência da descompressão dos gases queimados, e uma troca de massa pela parede, que permitiu de maneira aproximada considerar a troca de massa entre as seções transversais do cilindro, calculada a partir

da simulação do jato. Ou seja, para cada seção do cilindro e incremento de tempo, a diferença entre o resultado da massa calculada a partir da simulação do jato e a massa descarregada pelo simples deslocamento do pistão, foi modelada por um fluxo de massa através da parede, de modo que, quando a diferença foi positiva, uma dada vazão mássica teve que ser “injetada” na camada limite de expansão, e se negativa, massa foi “retirada”, para simular as variações de espessura da camada limite calculada como jato.

Vale mencionar que em ambos os modelos de camada limite, considerou-se temperatura uniforme, igual a da parede, e não interação com os gases queimados. A finalidade principal deste tratamento foi determinar o fluxo da massa a ser injetado através da parede, para cada seção do cilindro.

A contribuição diferenciada do presente modelo, está justamente na consideração do transporte convectivo axial, ao longo da camada limite. Mesmo modelos recentes pesquisados na literatura, referentes ao transporte e pós oxidação de hidrocarbonetos em motores, desprezam o efeito deste modo de transporte, por considerá-lo de menor importância frente ao transporte difusivo na direção normal à parede do cilindro.

Tais modelos consideram que os gases emergentes das frestas formam uma camada limite inicialmente em repouso, adjacente à parede, sofrendo em seguida processo de expansão e difusão unidirecional. Exemplos do emprego deste modelo podem ser encontrados em simulação unidimensional do mecanismo de formação de hidrocarbonetos em motores, nos trabalhos de MIN e CHENG (1994) ; NORRIS *et al.* (1996) ; WU e HOCHGREB (1997) ; SODRÉ e YATES (1997) ; SODRÉ (1999) ; TINAUT *et al.* (1999), ou mesmo em simulação multidimensional, implementada com KIVA II - código de escoamento reativo (SHIH ; ASSANIS, 1994).

Será mostrado que o fluxo axial da massa entre as seções deve ser considerado nos modelos de pós oxidação de hidrocarbonatos, ajudando a explicar as diferenças observadas entre resultados calculados e experimentais (WU ; HOCHGREB, 1997).

5.2 Equacionamento da Camada Limite

As interações de troca térmica e de massa entre a camada limite de mistura não queimada e os gases quentes no interior do cilindro foram consideradas desprezíveis. Com boa aproximação, a pressão na camada limite pode ser admitida igual à pressão de equilíbrio no cilindro, que portanto é imposta sobre a camada limite.

Um esquema deste modelo, e correspondente sistema de coordenadas, é apresentado na figura 5.1.

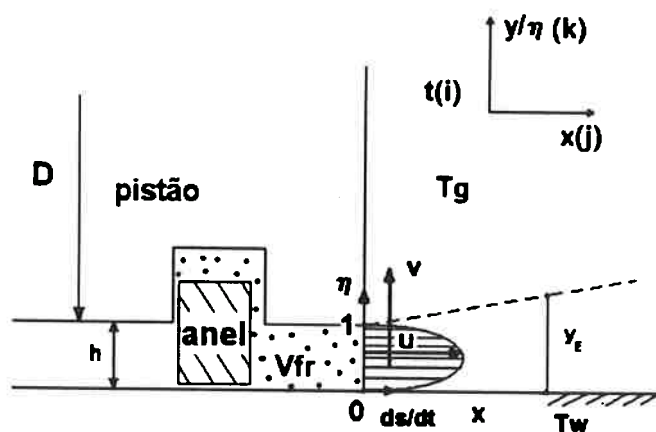


Fig. 5.1 Esquema do fluxo de mistura não-queimada (jato) saindo da região de frestas.

5.2.1 Equacionamento geral da camada limite

O problema básico consistiu no equacionamento de camada limite laminar, transiente e compressível, que se desenvolve ao longo da superfície do cilindro, a partir do perfil inicial de saída das frestas.

Na presença dos campos de velocidade, em relação ao pistão:

$u(x,y,t)$ - velocidade axial da mistura não-queimada, a partir da saída das frestas, e

$v(x,y,t)$ - velocidade radial, dentro da camada limite,

a conservação de massa (equação da continuidade) na sua forma diferencial, com relação ao problema apresentado, pode ser expressa como segue:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \cdot v) = 0 \quad (5.1)$$

e, para fluido Newtoniano, a equação diferencial de conservação da quantidade de movimento pode ser representada na forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot u) + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot u \cdot u) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \cdot v \cdot u) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \right) \quad (5.2).$$

De modo a parametrizar os perfis das velocidades u e v em função da espessura da camada limite y_E , procedeu-se à transformação para coordenadas x, η, t , sendo $\eta = y/y_E$.

Como $0 \leq \eta \leq 1$ no interior da camada limite, vem:

$$y = y_E \cdot \eta \quad , \text{ sendo } y = y(\eta, t), \quad \text{e:}$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial \eta} \cdot d\eta + \frac{\partial y}{\partial t} \cdot dt \quad \text{ou:}$$

$$dy = y_E \cdot d\eta + \eta \frac{\partial y_E}{\partial t} \cdot dt \quad (5.3).$$

Nas novas coordenadas, as equações (5.1) e (5.2) podem ser representadas como segue.

• equação da continuidade -

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{1}{y_E} \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \cdot \eta \cdot \frac{D y_E}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot u) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \cdot v) \cdot \frac{1}{y_E} = 0 \quad (5.4)$$

e como $\rho = \rho(t)$, ρ constante em x e η , vem:

$$\frac{y_E}{\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (y_E \cdot u) + \frac{\partial v}{\partial \eta} = 0 \quad (5.5),$$

se $f(t) = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial t}$, tem-se:

$$y_E \cdot f(t) + \frac{\partial}{\partial x} (y_E \cdot u) + \frac{\partial v}{\partial \eta} = 0 \quad (5.6);$$

integrando em η , de 0 a 1, e considerando as condições de contorno:

$$\eta = 0 \Rightarrow v = 0$$

$$\eta = 1 \Rightarrow v = \frac{\partial y_E}{\partial t}$$

vem:

$$y_E f(t) + \frac{\partial}{\partial x} \left(y_E \cdot \int u d\eta \right) = - \frac{\partial y_E}{\partial t} \quad (5.7).$$

• equação da quantidade de movimento -

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot u) - \frac{1}{y_E} \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \cdot u) \eta \frac{\partial y_E}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \cdot u \cdot u) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho \cdot v \cdot u) \frac{1}{y_E} = \left(\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\mu}{y_E} \right) \cdot \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \cdot \frac{1}{y_E} \quad (5.8),$$

multiplicando a equação acima por y_E/ρ , rearranjando os termos e combinando com a equação da continuidade (eq. 5.5) tem-se :

$$y_E \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial y_E}{\partial t} \cdot \eta \frac{\partial u}{\partial \eta} + y_E \cdot u \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial \eta} = \frac{\mu}{\rho \cdot y_E} \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} \quad (5.9).$$

Na equação (5.7), a função $f(t)$, descrita em termos da variação de ρ no ciclo, é conhecida a partir da evolução da pressão medida no cilindro, uma vez que para $T = const.$, vem :

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{P} \cdot \frac{\partial P}{\partial t} \quad (5.10).$$

Portanto, se o perfil $u(x, \eta, t)$ no instante anterior também for conhecido, obtém-se da equação (5.7) o valor $y_E(x, t)$. Assim determinado o valor de y_E , pode-se calcular a velocidade $v(x, \eta, t)$ através da equação (5.9).

Na determinação da função velocidade $u(x, \eta, t)$ para a condição de $x = 0$ - fluxo de saída de massa das frestas, adotou-se um perfil parabólico na seguinte forma:

$$u = a\eta^2 + b\eta + c \quad (5.11).$$

Com as condições de contorno :

$$\eta = 0 \Rightarrow u = ds/dt, \text{ onde } s \text{ é a distância do pistão ao cabeçote}$$

$$\eta = 1 \Rightarrow u = 0$$

e as relações de vazão mássica e de gás perfeito:

$$\frac{V_{fr}}{RT} \cdot \frac{dP}{dt} = \int_0^1 \rho \cdot u \cdot \pi \cdot D \cdot h \cdot d\eta \quad (5.12),$$

obteve-se os valores dos coeficientes a , b e c , que substituídos na equação (5.11), resultaram no perfil :

$$u = \left(3 \frac{ds}{dt} + C \frac{1}{P} \cdot \frac{dP}{dt} \right) \eta^2 - \left(4 \frac{ds}{dt} + C \frac{1}{P} \cdot \frac{dP}{dt} \right) \eta + \frac{ds}{dt} \quad (5.13),$$

com

$$C = \frac{6V_{fr}}{\pi \cdot D \cdot h}$$

As condições de contorno adotadas para a velocidade u para qualquer x , foram as seguintes:

$$\eta = 0 \Rightarrow u = ds/dt$$

$$\eta = 1 \Rightarrow u = x/s \cdot ds/dt$$

5.2.2 Cálculo numérico da camada limite

O sistema obtido de equações diferenciais parciais é parabólico, pois considerou-se que o fluxo axial da massa que sai das frestas caminha no mesmo sentido da coordenada x ($u > 0$); na solução numérica deste sistema empregou-se formulação por volume de controle em torno de cada ponto P da malha de cálculo, apresentada em detalhes por PATANKAR (1980) e resumida no esquema da figura 5.2, para um determinado instante t .

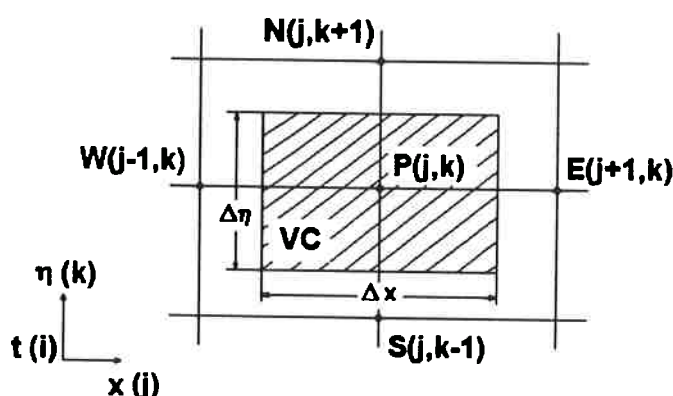


Fig. 5.2 Esquema da malha para cálculo numérico de problema bidimensional.

As equações diferenciais foram reescritas na forma discretizada espacial, mostrada a seguir em sua forma genérica, sendo que no presente estudo a função F assumiu os valores de $u(x, \eta, t)$; $v(x, \eta, t)$ e $y_E(x, t)$.

$$a_p F_p = a_E F_E + a_w F_w + a_N F_N + a_S F_S + b \quad (5.14).$$

Na equação (5.14), pode-se observar que o valor da função F no ponto P é média aritmética ponderada dos valores nos pontos circunvizinhos, através dos coeficientes

$a_E \dots a_S$, representando a condutância entre o ponto P e sua vizinhança, e do coeficiente b , representando as funções de fonte e os termos independentes.

Tal método de discretização traz algumas regras associadas que devem ser satisfeitas, como:

- os coeficientes de ponderação a devem ser positivos para garantir convergência para solução fisicamente realista;
- $a_P = \sum a_{vizinhança}$, significando que as equações diferenciais continuam sendo satisfeitas se uma constante é adicionada à variável dependente;
- continuidade respeitada nas faces de interação dos volumes de controle.

O método geral pelo qual equações diferenciais parabólicas são explicitadas em termos de diferenças finitas pressupõe fatores de ponderação f , variando de 0 a 1, que indicam o grau de dependência dos valores no ponto de cálculo com os valores circunvizinhos.

Em particular, valor $f = 0$ implica em método de discretização explícito, isto é, o valor da função no ponto P não depende dos valores vizinhos, desconhecidos no tempo considerado, mas é obtido explicitamente em termos dos valores conhecidos (no ponto e nos vizinhos) no tempo anterior. Qualquer esquema assumindo valores $f \neq 0$, são chamados de implícitos; no caso específico de $f = 0,5$, tem-se o conhecido método de Crank-Nicolson. O esquema totalmente implícito ($f = 1$) satisfaz plenamente critérios de estabilidade matemática - convergência de soluções, embora possa não oferecer respostas com grau satisfatório de precisão do fenômeno físico, dependendo dos passos de cálculo considerados.

No equacionamento em questão, adotou-se dois fatores de ponderação - f_t para o tempo e f_x para a coordenada axial, de modo a se deixar aberta a possibilidade de opção do método mais conveniente para cada função a ser calculada.

Para evitar eventuais instabilidades ou divergência na solução, principalmente em problemas envolvendo termos convectivos, teve-se a preocupação de procurar garantir que os coeficientes de ponderação $a_E \dots a_S$ fossem sempre positivos, valendo-se da aplicação do conceito de "upwind", no qual o valor da propriedade no ponto anterior é "carregado" com o fluxo para a interface do volume de controle do cálculo presente.

Na solução do sistema obtido de equações algébricas lineares (explicitadas em termos de diferenças finitas) foi empregado o algoritmo TDMA (*tridiagonal-matrix algorithm*), que prevê substituição progressiva para expressar o valor presente - F_j em termos dos subsequentes, por exemplo : F_j em termos de F_2 , sucessivamente até que F_{n-1} é obtido a partir de F_n , garantindo rápida convergência do cálculo numérico.

A malha de cálculo foi definida por parâmetros de entrada; para os casos aqui apresentados, foram seguidas as orientações:

- o passo fixo no tempo foi determinado em função da rotação do motor na condição de operação considerada no cálculo, de modo a resultar num intervalo de 1° de virabrequim, sendo analisado o processo desde o instante onde ocorre o valor máximo de pressão até o PMI (fim do curso de expansão); exemplificando, com o motor operando a 2800 rpm, o intervalo de tempo corresponde a cerca de 0,06 ms.
- a linha ao longo do cilindro, do cabeçote até a posição do PMI, foi dividida em 580 seções; para o motor em estudo, o intervalo Δx corresponde a cerca de 0,25 mm.

- a espessura da camada limite foi dividida em 12 partes, portanto $\Delta\eta = y_E / 12$.

Tendo como dados de entrada a evolução da pressão de combustão dentro do cilindro, ou seja, a função medida $P(t)$ e, através de cálculos geométricos, também a função ds/dt , a partir da equação (5.13) foi possível calcular os perfis $u(\eta, t)$ de saída da fresta para cada seção x fixa na malha de cálculo, que vai sendo progressivamente descoberta pelo pistão, em seu movimento descendente.

A evolução destes perfis, ou seja, a função $u(x, \eta, t)$ é explicitada a partir da equação da quantidade de movimento (eq. 5.9) na sua forma discretizada como segue :

$$a_P(k) \cdot u(i, j, k) = a_w(k) \cdot u(i, j - 1, k) + a_N(k) \cdot u(i, j, k + 1) + a_S(k) \cdot u(i, j, k - 1) + b \quad (5.15)$$

com os coeficientes de ponderação e o termo independente representados a seguir :

$$a_w(k) = \frac{y_E(i, j) \cdot u_j^0(i, j, k)}{\Delta x}$$

$$a_N(k) = \frac{\mu(i)}{\rho(i)y_E(i, j) \cdot \Delta\eta^2} + \frac{1}{2} [A + |A|]$$

$$a_S(k) = \frac{\mu(i)}{\rho(i)y_E(i, j) \cdot \Delta\eta^2} + \frac{1}{2} [-A + |-A|]$$

$$b(k) = \frac{y_E(i, j)}{\Delta t} \cdot u(i - 1, j, k)$$

$$A = \frac{v_{ij}(k)}{\Delta\eta} - [y_E(i, j) - y_E(i - 1, j)] \cdot \frac{(k - 1)}{\Delta t}$$

O termo convectivo A é somado aos coeficientes a_N e a_S , sob a ótica do conceito "upwind", ou seja, somente o ponto a jusante, que depende do sentido da velocidade $v(x, \eta, t)$, é que recebe as informações contidas neste termo A .

A equação da continuidade (eq. 5.7) na forma discretizada fornece a expressão que define a função de evolução da espessura da camada limite $y_E(x, t)$, ou $y_E(i, j)$:

$$y_E(i, j) = a(i, j-1) \cdot y_E(i, j-1) + a(i-1, j) \cdot y_E(i-1, j) + a(i-1, j-1) \cdot y_E(i-1, j-1) \quad (5.16)$$

onde os coeficientes a são função de $u(x, \eta, t)$ e $f(t)$; exemplificando:

$$a(i, j-1) = \frac{\frac{1}{\Delta x} \int_0^1 u \cdot d\eta \Big|_{i, j-1} - \frac{f(i)}{2} - \frac{1}{\Delta t}}{\frac{1}{\Delta x} \int_0^1 u \cdot d\eta \Big|_{i, j} + \frac{f(i)}{2} + \frac{1}{\Delta t}}$$

A determinação do termo de velocidade transversal $v_{ij}(k)$ vem da integração e discretização da equação da continuidade, diretamente na forma apresentada na equação (5.6); o procedimento resulta em:

$$v_{ij}(k) = -y_E(i, j) \cdot \Delta \eta \left[f(i) \cdot (k-1) + \frac{1}{2\Delta x} \cdot \sum_k B \right] - [y_E(i, j) - y_E(i, j-1)] \cdot \frac{\Delta \eta}{2\Delta x} \cdot \sum_k C \quad (5.17)$$

$$\sum_k B = \sum_{l=1}^{k-1} u(i, j, l) + u(i, j, l+1) - u(i, j-1, l) - u(i, j-1, l+1)$$

$$\sum_k C = \sum_{l=1}^{k-1} u(i, j, l) + u(i, j, l+1)$$

5.2.3 Equacionamento da espessura da camada descarregada pelo pistão

Para o tratamento da camada limite descarregada pelo movimento do pistão, aqui denominada de “expansão”, considerou-se inicialmente que, para cada intervalo de tempo Δt , um dado elemento de massa Δm emerge das frestas, em correspondência ao trecho de seção Δx descoberto pela descida do pistão, tal que:

$$\frac{\Delta m}{\Delta t} = \pi \cdot D \cdot h_0 \cdot \frac{\Delta x}{\Delta t} \cdot \rho_0$$

$$\frac{dm}{dt} = \pi \cdot D \cdot h_0 \cdot \rho_0 \cdot \frac{ds}{dt} \quad (5.18).$$

Equacionando a vazão dm/dt em termos da lei dos gases perfeitos aplicada para a região das frestas, vem :

$$P \cdot V_{fr} = m_{fr} \cdot \bar{R} \cdot T_{fr} \quad (5.19),$$

sendo que na condição de saída das frestas :

$$P = \frac{m_{fr}}{V_{fr}} \bar{R} \cdot T_{fr} = \rho_0 \bar{R} \cdot T_{fr} \quad (5.20).$$

Considerando que a temperatura dos gases nas frestas é invariável, pode-se derivar a eq. (5.19), de modo a se obter :

$$\frac{dP}{dt} \cdot V_{fr} = \frac{dm_{fr}}{dt} \cdot \bar{R} \cdot T_{fr} \quad (5.21).$$

Com a substituição da eq. (5.20) na eq. (5.21) e lembrando que $\frac{dm_{fr}}{dt} = -\frac{dm}{dt}$, tem-se:

$$\frac{dP}{dt} \cdot V_{fr} = -\frac{dm}{dt} \cdot \frac{P}{\rho_0}$$

ou :

$$\frac{dm}{dt} = -\rho_0 \cdot \frac{1}{P} \cdot \frac{dP}{dt} \cdot V_{fr} \quad (5.22),$$

comparando os termos das equações (5.18) e (5.22), chega-se a :

$$\pi \cdot D \cdot h_0 \cdot \rho_0 \frac{ds}{dt} = -\rho_0 \cdot \frac{1}{P} \cdot \frac{dP}{dt} \cdot V_{fr} \quad (5.23).$$

Portanto, a espessura inicial de cada camada limite de expansão, pode ser representada por :

$$h_0(x,0) = -\frac{1}{P} \cdot \frac{dP}{dt} \cdot \frac{V_{fr}}{\pi D} \cdot \frac{1}{ds/dt} \quad (5.24).$$

Com o elemento de massa sofrendo o efeito de descompressão no cilindro, a camada limite originada em cada seção descoberta se expande na razão :

$$h(x, t) = h_0(x,0) \cdot \frac{\rho_0}{\rho(t)} \quad \text{e, portanto :}$$

$$h(x, t) = -\frac{1}{P} \cdot \frac{dP}{dt} \cdot \frac{V_{fr}}{\pi D} \cdot \frac{1}{ds/dt} \cdot \frac{\rho_0}{\rho} \quad (5.25).$$

5.2.4 Vazão mássica de ajuste

Para reproduzir a espessura da camada limite calculada a partir do desenvolvimento do jato, partindo da espessura da camada limite de expansão, simulou-se uma injeção de massa pela parede, cujo valor decorre diretamente da subtração dos termos da equação que representa o desenvolvimento desta última (eq. 5.25) daqueles valores obtidos na solução numérica da evolução da espessura da camada limite do jato (eq. 5.16); explicitando já na forma discretizada :

$$\frac{\Delta m}{\Delta t} = \frac{\pi D}{\Delta t} \cdot \Delta x \{ [(y_E - h) \cdot \rho]_{+\Delta t} - [(y_E - h) \cdot \rho] \} \quad (5.26).$$

5.3 Modelo de Difusão Turbulenta

Na modelagem do processo de difusão e reação dos hidrocarbonetos na camada limite, foi inserido o efeito da turbulência, ao se considerar no cálculo dos coeficientes gerais de difusividade mássica D e condutibilidade térmica λ_T as contribuições da difusão molecular (laminar) e de turbulência, na forma :

$$\begin{aligned} \lambda_T &= \lambda_l + \nu_t \cdot \rho \cdot C_P \\ D_{CH_4} &= D_{l_{CH_4}} + \nu_t \\ D_{O_2} &= D_{l_{O_2}} + \nu_t \end{aligned} \quad (5.27).$$

Note-se que foi admitida igualdade entre os termos de difusividade térmica turbulenta, difusividade mássica turbulenta, e também viscosidade cinemática turbulenta, possível em decorrência de se adotar valores unitários para os números de *Lewis* e *Prandtl* -

relação entre transporte de calor e difusão molecular e entre quantidade de movimento e transporte de calor, respectivamente, ambos referidos ao transporte turbulento.

O coeficiente de difusividade turbulenta geral ν_t , partindo de formulação de modelo de turbulência $k - \varepsilon$ de LAUNDER e SPALDING (1974), toma a forma :

$$\nu_t = C\mu \cdot l \cdot \sqrt{k_t} \quad (5.28).$$

Para o cômputo de ν_t as seguintes hipóteses simplificadoras foram adotadas :

- no interior da camada limite a energia cinética turbulenta foi considerada uniforme, com valor igual àquele atribuído aos gases queimados, no interior do cilindro;
- a constante de proporcionalidade da dissipação de turbulência no interior do cilindro c_μ foi adotada com o valor de $c_\mu = 0,09$;
- como a região considerada no cálculo se encontrava adjacente à parede do cilindro, a escala integral de comprimento l foi admitida como sendo a coordenada y (distância até a parede na direção radial) ;
- energia cinética de turbulência k_t , isotrópica no interior do cilindro, decai rapidamente após a combustão, na forma das expressões :

$$\frac{k_t}{k_{t_0}} = \left[1 + (C_\varepsilon - 1) \cdot \frac{t}{\tau_0} \right]^{-\frac{1}{C_\varepsilon - 1}} \quad \text{com} \quad \tau_0 = \frac{l_0}{\sqrt{k_{t_0}}} \quad (5.29),$$

obtidas a partir do seguinte equacionamento do modelo $k - \varepsilon$:

$$\frac{d k_t}{dt} = -\varepsilon$$

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{C_\varepsilon \cdot \varepsilon^2}{k_t} \quad (5.30);$$

medições de decaimento de turbulência, citadas em NORRIS *et al.* (1996), indicaram um bom ajuste quando a constante c_ε assume o valor $c_\varepsilon = 1,9$;

- experimentos realizados em motores de ignição por centelha forneceram a base para a adoção das relações e valores de constantes apresentadas a seguir (WU ; HOCHGREB, 1997); considerou-se que no início dos cálculos (foi escolhido o tempo referente a 15° de virabrequim após o PMS), a energia cinética de turbulência está relacionada à intensidade de turbulência inicial u'_o e esta à velocidade média do pistão S_p através das relações :

$$k_{t_0} = \frac{3}{2} (u'_o)^2$$

$$u'_o = 0,75 \cdot S_p \quad (5.31);$$

- a escala integral de comprimento inicial l_0 pode ser calculada a partir da relação proposta por HEYWOOD (1988), onde h é a distância entre o cabeçote e o topo do pistão, quando este passa pelo PMS :

$$l_0 \approx 0,22 \cdot h \quad (5.32).$$

Realizando as devidas substituições de relações e valores empíricos adotados no modelo, e descritos acima, a equação (5.28) toma a forma :

$$v_t = 0,09 \cdot y \cdot \sqrt{k_t} \quad (5.33)$$

onde

$$k_t = 0,844 S_P^2 \left(1 + 0,827 \cdot \frac{S_P}{l_0} \cdot t \right)^{-1/0,9} \quad (5.34).$$

5.4 Modelo de Cinética de Oxidação

O mecanismo detalhado da cinética química de oxidação do metano a altas temperaturas ($T > 1000$ K) foi apresentado por WESTBROOK e DRYER(1984), onde os efeitos de transporte de massa e calor foram desprezados. Este mecanismo, muito citado na literatura, envolve reações de recombinação de radicais, originando significativa produção de hidrocarbonetos mais pesados, cujos mecanismos de subsequentes reações de consumo foram incluídos, resultando em complexo sistema de cinética química.

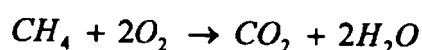
DAGAUT *et al.* (1991) em artigo também muito referenciado, atualizaram e ampliaram mecanismo detalhado de oxidação de metano a altas temperaturas, validando-o para altas pressões (até 10 atm), através de experimentos em reatores de jato uniforme. O mecanismo, que envolveu 200 reações, foi estendido por HUNTER *et al.* (1994) para 207 reações e 40 espécies químicas, de modo a melhor representar a oxidação de metano em motores de combustão interna.

Em geral, tais modelos superestimam a contribuição do controle da oxidação através da concentração de radicais, uma vez que não consideram o processo de diluição dos hidrocarbonetos das frestas com os gases queimados no interior do cilindro, parte fundamental no fenômeno.

Quando o mecanismo de oxidação do metano leva em conta modelagem básica do processo de difusão, inerente à pós oxidação durante a fase de expansão, aumenta-se consideravelmente a complexidade da simulação, tornando-se conveniente simplificações na cinética química.

Neste caso, são freqüentemente empregados mecanismos simplificados, na forma de uma equação global para a razão de reação, baseada na teoria de Arrhenius, que representa um comportamento médio aproximado de todas as taxas das reações individuais envolvidas na cinética química.

No modelo simplificado de oxidação do metano, empregado neste estudo, foram usados coeficientes empíricos globais propostos por VILIENSKII e HEZMALIAN (1978), como segue :



$$\frac{d[CH_4]}{dt} = -\frac{A}{T} \cdot [CH_4] \cdot [O_2] \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (5.35),$$

onde o fator A e a razão entre energia de ativação e constante universal dos gases perfeitos E/R assumem os valores $3,552 \times 10^{14} \text{ m}^3 \cdot \text{K} / \text{kmol} \cdot \text{s}$ e 15.700 K respectivamente; o símbolo $[]$ denota a concentração de cada espécie química, com a unidade no S. I. de kmol/m^3 , assim como a temperatura T em K e tempo t em s.

A equação (5.35) pode ser reescrita, na forma de razão de geração ou consumo mássico da espécie química, no caso razão de consumo do metano $\dot{\omega}_{CH_4}$, de modo a se tornar mais adequada para substituição em expressões de conservação das espécies químicas e de energia.

$$\dot{\omega}_{CH_4} = -\frac{A}{T} \cdot M_{CH_4} \cdot [CH_4] \cdot [O_2] \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (5.36)$$

Sendo :

$$[CH_4] = \rho \frac{X_{CH_4}}{M_{CH_4}} \quad \text{e} \quad [O_2] = \rho \frac{X_{O_2}}{M_{O_2}}$$

vem :

$$\dot{\omega}_{CH_4} = -\frac{A}{T} \cdot \rho^2 \cdot \frac{1}{M_{O_2}} \cdot X_{CH_4} \cdot X_{O_2} \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (5.37)$$

onde M_i e X_i são o peso molecular e a fração mássica da espécie i , respectivamente, e ρ a densidade da mistura de gases no cilindro.

Procedendo às substituições análogas para o consumo mássico de oxigênio, tem-se a expressão resultante :

$$\dot{\omega}_{O_2} = -\frac{A}{T} \cdot \rho^2 \cdot \frac{2}{M_{CH_4}} \cdot X_{CH_4} \cdot X_{O_2} \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (5.38)$$

ou substituindo a eq. (5.37) na expressão acima, resulta em :

$$\dot{\omega}_{O_2} = 2 \frac{M_{O_2}}{M_{CH_4}} \cdot \dot{\omega}_{CH_4} \quad (5.39)$$

Representando o metano pela espécie 1 e o oxigênio pela espécie 2 , vem :

$$\dot{\omega}_1 = -\frac{A}{T} \rho^2 \frac{1}{M_2} \cdot X_1 \cdot X_2 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (5.40),$$

$$\dot{\omega}_2 = 2 \frac{M_2}{M_1} \cdot \dot{\omega}_1 \quad (5.41).$$

5.5 Propriedades Físico-Químicas

A resolução das equações diferenciais que regem o fenômeno de transporte e reação de pós oxidação dos hidrocarbonetos proveniente das frestas, requer que sejam conhecidas algumas propriedades termodinâmicas e de transporte das misturas gasosas contidas no interior do cilindro e na camada limite reativa.

5.5.1 Propriedades termodinâmicas

Para a mistura de ar e gases combustíveis, admitida como mistura de gases ideais, não foram consideradas eventuais frações de gases queimados, e foi levado em conta que o motor a gás natural, utilizado nos experimentos de validação do modelo, opera com mistura ligeiramente pobre ($\lambda \sim 1,2$).

Em relação aos gases presentes no cilindro durante o curso de expansão, processos de dissociação nos produtos de combustão foram desprezados, no intervalo considerado de temperaturas, de forma que foram feitas simplificações e empregadas relações empíricas específicas para os produtos de combustão em motores (portanto, em equilíbrio termodinâmico), sugeridas por HEYWOOD (1988) e aqui utilizadas.

Os valores de calor específico a pressão constante C_p , para gás perfeito função unicamente da temperatura, e razão de calores específicos (coeficiente politrópico) k para a mistura combustível e produtos de combustão são usualmente fornecidos por tabelas termoquímicas JANAF (GARDINER; BURCAT, 1984), muitos dos dados ajustados por expressões polinomiais elaboradas pela NASA (WAY, 1977). De forma a simplificar o problema, foram utilizados valores médios, ajustados para a faixa de temperatura entre 500 e 1500 K, e aqui considerados constantes.

O valor utilizado para o calor de combustão do metano, isto é, o calor gerado pela sua reação de oxidação, foi retirado de trabalho de FERGUSON (1986), onde são apresentadas tabelas de propriedades termodinâmicas voltadas para uso em motores de combustão interna.

5.5.2 Propriedades de transporte

Para as misturas combustíveis, admitiu-se a hipótese simplificadora que as propriedades de transporte pudessem ser aproximadas pelas do ar. Para a estimativa da viscosidade dinâmica do ar, HEYWOOD (1988) sugeriu a seguinte expressão, função apenas da temperatura, ressaltando se tratar de propriedade praticamente independente da pressão.

$$\mu_{ar} = 3,3 \times 10^{-7} T^{0,7} \text{ [kg/m.s]} \quad (5.42a).$$

Dados experimentais da viscosidade dinâmica dos produtos da combustão de hidrocarbonetos, num amplo espectro de condições - temperaturas de 500 K a 4000 K e pressões de 1 a 100 atm, foram ajustados numa expressão que remete à anterior,

corrigida em função da razão ar-combustível relativa, como segue :

$$\mu = \frac{\mu_{ar}}{1 + 0,027/\lambda}$$

Para mistura de gases poliatômicos (mistura combustível), HEYWOOD (1988) sugeriu a seguinte expressão empírica, que apresentou bom ajuste contra dados experimentais, para o cálculo da condutibilidade térmica λ_T :

$$\lambda_T = \frac{9k-5}{4} \frac{C_p}{k} \mu \quad (5.42b)$$

Substituindo os valores médios encontrados, válidos para a faixa de temperatura considerada no cálculo, entre temperatura de parede e dos gases queimados, obteve-se a seguinte estimativa :

$$\lambda_T = 5,1 \times 10^{-7} T^{0,7} \text{ [kJ/m.s.K]}$$

Como não se dispunha de dados experimentais dos coeficientes de difusão, em função da pressão e temperatura, para o metano e o oxigênio no ar atmosférico, usado como aproximação em relação aos produtos de combustão no cilindro, empregou-se o método de estimativa proposto por WILKE e LEE (PERRY *et al.*, 1963), que se baseou na teoria cinética dos gases.

As relações entre a difusividade mássica molecular D , e a pressão P e temperatura T , reinantes no cilindro, foram expressas em termos de coeficientes relacionados à colisão molecular, para ambos os gases, como segue :

- metano no ar :

$$D_{11} [\text{m}^2/\text{s}] = \frac{6,122 \times 10^{-9} T^{1,5} [\text{K}]}{P [\text{atm}]} \quad (5.43a);$$

- oxigênio no ar :

$$D_{12} [\text{m}^2/\text{s}] = \frac{5,874 \times 10^{-9} T^{1,5} [\text{K}]}{P [\text{atm}]} \quad (5.43b).$$

5.6 Modelagem e Equacionamento de Transporte e Reação

Como resultado dos cálculos apresentados nos itens anteriores, obteve-se a vazão de massa injetada através da parede para cada seção do cilindro.

A seguir, é apresentado o equacionamento unidimensional, que rege os fenômenos de troca da massa, calor e espécies químicas entre a camada limite, com injeção da massa através da parede, e o núcleo de gases queimados.

Partindo da equação diferencial geral que descreve o princípio de conservação, e aplicando-a para a conservação de massa e de espécies químicas, pode-se representar :

- conservação de massa (equação da continuidade) :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \cdot v) = 0 \quad (5.44),$$

- conservação das espécies químicas (em função das frações mássicas X_i) :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho X_i) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho v X_i) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_i \cdot \frac{\partial X_i}{\partial y} \right) + S \quad (5.45)$$

sendo que D_i é o coeficiente de difusão e S representa o termo fonte.

Representando, neste caso, o termo fonte pela velocidade de geração ou consumo da espécie i devido às reações químicas $\dot{\omega}_i$, a equação (5.45) toma a forma da seguinte expressão :

$$\rho \left(\frac{\partial X_i}{\partial t} + v \frac{\partial X_i}{\partial y} \right) - \rho \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(D_i \cdot \frac{\partial X_i}{\partial y} \right) - \dot{\omega}_i = 0 \quad (5.46)$$

Considerando desprezíveis os fluxos de entalpia, associados à difusão das espécies químicas, decorrentes dos gradientes de temperatura e concentração, assim como a dissipação viscosa (escoamento a baixas velocidades), a equação da energia pode ser escrita como segue :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_T \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{dP}{dt} + \Sigma \dot{\omega}_i \Delta h_i = 0 \quad (5.47)$$

onde C_p é o calor específico, λ_T é a condutibilidade térmica e Δh_i representa o calor gerado pela reação de oxidação das espécies químicas.

No processo de reação do gás metano, as espécies químicas relacionadas na expressão de conservação (eq. 5.46) ficaram resumidas ao metano - espécie 1 e ao oxigênio - espécie 2, obtendo-se, em consequência, duas equações de conservação de espécies químicas :

- conservação do metano CH_4 :

$$\rho \left(\frac{\partial X_1}{\partial t} + v \frac{\partial X_1}{\partial y} \right) - \rho \frac{\partial}{\partial y} \left(D_1 \cdot \frac{\partial X_1}{\partial y} \right) - \dot{\omega}_1 = 0 \quad (5.48)$$

- conservação do oxigênio O_2 :

$$\rho \left(\frac{\partial X_2}{\partial t} + v \frac{\partial X_2}{\partial y} \right) - \rho \frac{\partial}{\partial y} \left(D_2 \cdot \frac{\partial X_2}{\partial y} \right) - \dot{\omega}_2 = 0 \quad (5.49)$$

onde $\dot{\omega}_1$ e $\dot{\omega}_2$ vieram das expressões derivadas do equacionamento da cinética de oxidação do metano (eqs. 5.40 e 5.41).

A equação geral de energia (eq. 5.47), para a oxidação do metano, toma a forma :

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{dP}{dt} + \dot{\omega}_1 \cdot \Delta h = 0 \quad (5.50)$$

O equacionamento geral de transporte e reação pode ser desenvolvido em novas variáveis, assim definidas :

$$\eta = \int_0^y \frac{\rho}{M} dy \quad (5.51),$$

$$\tau = t$$

onde a coordenada adimensional da camada limite η teria o significado físico da razão entre a massa contida num volume, posicionado numa dada seção de coordenada x , e definido até a distância y normal à parede do cilindro, atravessando a camada limite, e uma massa total M dentro do volume referente a esta seção ; ambas as massas consideradas por unidade de área. Deve-se mencionar que a massa M deve ser suficientemente grande para que os gradientes de concentração e temperatura do lado dos gases queimados seja aproximadamente zero.

Derivando no tempo a nova variável $\eta(y,t)$, vem :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \int_0^y \frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot \frac{1}{M} \cdot dy \quad (5.52)$$

e substituindo a equação da continuidade (eq. 5.44) na expressão acima, fica :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \int_0^y - \frac{\partial}{\partial y} (\rho v) \cdot \frac{1}{M} \cdot dy = \frac{1}{M} - \rho v \Big|_0^y = - \frac{1}{M} (\rho v - \rho_w v_w) \quad (5.53)$$

portanto :

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\rho_w v_w}{M} - \frac{\rho v}{M} \quad (5.54):$$

e a derivada, na coordenada radial y , da variável η toma a forma :

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} = \int_0^y \frac{\partial \rho}{\partial y} \cdot \frac{1}{M} dy = \frac{\rho}{M} \quad (5.55)$$

Considerando uma função genérica $\phi = \phi(\eta, \tau) = \phi(y, t)$ e tomando sua diferencial, obtém-se:

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial y} \quad (5.56).$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\partial \phi}{\partial \tau} + \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial t}$$

Considerando a derivada toral da função genérica ϕ :

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \cdot v \quad (5.57),$$

obtém-se nas novas variáveis:

$$\frac{D\phi}{Dt} = \frac{\partial\phi}{\partial\tau} + \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \cdot \frac{\partial\eta}{\partial t} + \frac{\partial\phi}{\partial\eta} \cdot \frac{\partial\eta}{\partial y} \cdot v \quad (5.58).$$

As equações de conservação de espécies químicas (eqs. 5.48 e 5.49) foram, então, reescritas nas novas variáveis :

• espécie 1 :

$$\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial X_1}{\partial\tau} + \frac{\rho_w v_w}{M} \cdot \frac{\partial X_1}{\partial\eta} \right) - \frac{1}{M^2} \cdot \frac{\partial}{\partial\eta} \left(D_1 \rho \frac{\partial X_1}{\partial\eta} \right) - \dot{\omega}_1 = 0 \quad (5.59)$$

e considerando a vazão mássica "injetada" através da parede $dm_w/dt = \rho_w \cdot v_w$, que é resultante do cálculo da vazão mássica de ajuste (eq. 5.26); a equação de gases ideais $\rho = P/RT$ e as relações de consumo mássico das espécies químicas, vem :

$$\frac{RT}{P} \left(\frac{\partial X_1}{\partial\tau} + \frac{\dot{m}_w}{M} \cdot \frac{\partial X_1}{\partial\eta} \right) - \frac{1}{M^2} \cdot \frac{\partial}{\partial\eta} \left(D_1 \cdot \frac{P}{RT} \cdot \frac{\partial X_1}{\partial\eta} \right) + \frac{A}{T} \cdot \frac{1}{M_2} X_1 X_2 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) = 0 \quad (5.60);$$

• espécie 2 (desenvolvimento análogo) :

$$\frac{RT}{P} \left(\frac{\partial X_2}{\partial\tau} + \frac{\dot{m}_w}{M} \cdot \frac{\partial X_2}{\partial\eta} \right) - \frac{1}{M^2} \cdot \frac{\partial}{\partial\eta} \left(D_2 \cdot \frac{P}{RT} \cdot \frac{\partial X_2}{\partial\eta} \right) + \frac{A}{T} \cdot \frac{2}{M_1} X_1 X_2 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) = 0 \quad (5.61).$$

Nas variáveis η e τ a equação geral da energia (eq. 5.50) pode ser reescrita :

$$C_p(T) \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial \alpha} + \frac{\dot{m}_w}{M} \cdot \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) - \frac{1}{M^2} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\lambda_r \frac{P}{RT} \cdot \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) - \frac{RT}{P} \cdot \frac{dP}{dt} - \frac{P}{RT} \cdot \frac{A}{T} \cdot \frac{1}{M_2} \cdot X_1 X_2 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \Delta h = 0 \quad (5.62).$$

Sendo que o cálculo de y nas novas variáveis, advém diretamente da definição da variável η , ou seja :

$$y = \int_0^\eta \frac{M}{\rho} d\eta = \int_0^\eta \frac{M \cdot RT}{P} d\eta = \frac{MR}{P} \int_0^\eta T d\eta \quad (5.63).$$

Ao sistema de equações diferenciais (eqs. 5.60 ; 5.61 ; 5.62 ; 5.63), cuja resolução no tempo fornece os perfis das concentrações de metano X_1 e oxigênio X_2 , além do perfil da temperatura T para cada seção x , foram associadas as seguintes condições de contorno :

- na parede ($\eta = 0$) :
- temperatura constante durante o processo de expansão $T_w = const. = 470 K$ (média entre as temperaturas do pistão, anéis e superfícies do cilindro);
- gradiente de concentração das espécies químicas nulos; quando não há fluxo de massa através da parede, não há fluxo de espécies e, quando se considera o efeito do transporte entre seções, admite-se que seções vizinhas tenham a mesma concentração;
- fluxo de massa "através da parede" conhecido, por unidade de área:

$$dm_w/dt = \rho_w \cdot v_w ;$$

- numa região ao longe ($\eta = \eta_\infty$) :
- temperatura dos gases queimados conhecida, variável no tempo, como resultado da simulação termodinâmica do ciclo de trabalho do motor $T_g = T_g(t)$;
- frações mássicas do metano $X_{1\infty} \sim 0$ e oxigênio $X_{2\infty}$ em função de λ .

Como condições iniciais ($t = 0$), tem-se :

- espessura inicial da camada limite dada pela eq. (5.24) para $t = 0$; quando é considerado o transporte de massa entre as seções, este valor é corrigido para o valor inicial da camada limite do jato (o valor correspondente na coordenada η é η_f).
- perfil inicial de concentração das espécies "em degrau" :

$$X_1(0, \eta) = \frac{16,04}{16,04 + 274,66 \lambda} \quad \text{para } 0 \leq \eta \leq \eta_f$$

$$X_1(0, \eta) = 0 \quad \text{para } \eta_f < \eta \leq \eta_\infty$$

$$X_2(0, \eta) = \frac{64,00 \lambda}{16,04 + 274,66 \lambda} \quad \text{para } 0 \leq \eta \leq \eta_f$$

$$X_2(0, \eta) = \frac{64,00 (\lambda - 1)}{16,04 + 274,66 \lambda} \quad \text{para } \eta_f < \eta \leq \eta_\infty$$

- perfil inicial também "em degrau" para a temperatura :

$$T(0, \eta) = T_w \quad \text{para } 0 \leq \eta \leq \eta_f$$

$$T(0, \eta) = T_g(t_0) \quad \text{para } \eta_f < \eta \leq \eta_\infty$$

As equações diferenciais foram reescritas na forma de diferenças finitas, utilizando método totalmente implícito.

A equação de conservação do metano na forma discretizada, pode ser representada como segue:

$$a_p(j) \cdot X_1(i, j) = a_N(j) \cdot X_1(i, j + 1) + a_S(j) \cdot X_1(i, j - 1) + a_{OLD}(j) \cdot X_1(i - 1, j) \quad (5.64),$$

com os seguintes coeficientes de ponderação e termo independente :

$$a_p(j) = a_N(j) + a_S(j) + a_{OLD}(j) + b(j)$$

$$b(j) = \frac{A}{T(i-1, j) + T(i, j)} \cdot \frac{1}{M_2} (X_2(i-1, j) + X_2(i, j)) \cdot \exp\left(\frac{-2E}{RT(i-1, j) + T(i, j)}\right)$$

$$a_N(j) = \frac{R}{2\Delta\eta} \left(\frac{T(i, j)}{P(i)} + \frac{T(i-1, j)}{P(i-1)} \right) \cdot \frac{-\dot{m}_w + |\dot{m}_w|}{2M} + \frac{1}{M^2} \cdot \left(\frac{D_1(i, j+1) + D_1(i, j)}{2} \cdot \frac{P(i)}{RT(i)} + \frac{D_1(i-1, j+1) + D_1(i-1, j)}{2} \cdot \frac{P(i-1)}{RT(i-1)} \right)$$

$$a_S(j) = \frac{R}{2\Delta\eta} \left(\frac{T(i, j)}{P(i)} + \frac{T(i-1, j)}{P(i-1)} \right) \cdot \frac{\dot{m}_w + |\dot{m}_w|}{2M} + \frac{1}{M^2} \cdot \left(\frac{D_1(i, j-1) + D_1(i, j)}{2} \cdot \frac{P(i)}{RT(i)} + \frac{D_1(i-1, j-1) + D_1(i-1, j)}{2} \cdot \frac{P(i-1)}{RT(i-1)} \right)$$

$$a_{OLD}(j) = \frac{R}{2\Delta t} \left(\frac{T(i, j)}{P(i)} + \frac{T(i-1, j)}{P(i-1)} \right)$$

Procedimento análogo foi empregado para a equação de conservação de oxigênio.

A equação de energia discretizada toma a seguinte forma:

$$a_p(j) \cdot T(j) = a_N(j) \cdot T(i, j+1) + a_S(j) \cdot T(i, j-1) + a_{OLD}(j) \cdot T(i-1, j) + S(j) \quad (5.65),$$

onde os coeficientes de ponderação, termo fonte e termo independente são representados a seguir :

$$a_p(j) = a_N(j) + a_S(j) + a_{OLD}(j) + b(j)$$

$$b(j) = -\frac{R}{2} \left(T(i-1, j) \cdot \frac{DP(i-1)}{P^2(i-1)} + T(i, j) \cdot \frac{DP(i)}{P^2(i)} \right) + S(j)$$

$$S(j) = \frac{A \cdot \Delta H}{T(i-1, j) + T(i, j)} \cdot \exp\left(\frac{-2E}{RT(i-1, j) + T(i, j)}\right) \cdot (X_2(i-1, j) + X_2(i, j)) \cdot (X_1(i-1, j) + X_1(i, j)) \cdot \frac{1}{2 M_2}$$

$$a_N(j) = \frac{R}{2\Delta\eta} C_p \left(\frac{T(i, j)}{P(i)} + \frac{T(i-1, j)}{P(i-1)} \right) \cdot \frac{-\dot{m}_w + |\dot{m}_w|}{2M} + \frac{1}{M^2} \left(\frac{\lambda_T(i, j+1) + \lambda_T(i, j)}{2} \cdot \frac{P(i)}{RT(i)} + \frac{\lambda_T(i-1, j+1) + \lambda_T(i-1, j)}{2} \cdot \frac{P(i-1)}{RT(i-1)} \right) \cdot \frac{(RT(i-1, j) + T(i, j))}{P(i) + P(i-1)}$$

$$a_S(j) = \frac{R}{2\Delta\eta} C_p \left(\frac{T(i, j)}{P(i)} + \frac{T(i-1, j)}{P(i-1)} \right) \cdot \frac{\dot{m}_w + |\dot{m}_w|}{2M} + \frac{1}{M^2} \cdot \left(\frac{\lambda_T(i, j-1) + \lambda_T(i, j)}{2} \cdot \frac{P(i)}{RT(i)} + \frac{\lambda_T(i-1, j-1) + \lambda_T(i-1, j)}{2} \cdot \frac{P(i-1)}{RT(i-1)} \right) \cdot \frac{(RT(i-1, j) + T(i, j))}{P(i) + P(i-1)}$$

$$a_{OLD}(j) = \frac{R}{2\Delta t} C_p \left(\frac{T(i, j)}{P(i)} + \frac{T(i-1, j)}{P(i-1)} \right)$$

Na solução numérica do sistema de equações algébricas lineares (discretizadas) foi empregado o algoritmo TDMA (*tridiagonal-matrix algorithm*), que permitiu a utilização de maiores intervalos de tempo, apresentando características de estabilidade e convergência.

6. RESULTADOS DE SIMULAÇÃO - APRESENTAÇÃO E ANÁLISE

Antes do início da análise dos resultados obtidos relativos à evolução da camada limite e pós oxidação dos hidrocarbonetos, cumpre apresentar o conceito básico que justifica a abordagem seguida.

A figura 6.1 ilustra a velocidade média de saída do jato de mistura das frestas, calculada com base na eq. (5.22), função do gradiente de pressão no cilindro, em conjunto com a velocidade instantânea do pistão, para o caso base - metano a plena potência.

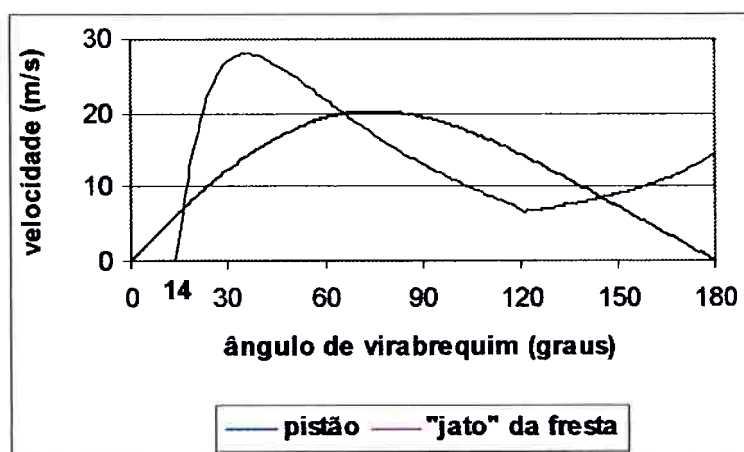


Fig. 6.1 - Velocidades instantânea do pistão e média de saída "do jato" das frestas.

Observa-se que poucos graus após o pico de pressão na câmara de combustão (14° após o PMS), a velocidade média de saída do jato supera em muito a velocidade do pistão, o que causa um movimento da mistura das frestas no sentido do cabeçote. Com o aumento da velocidade do pistão e redução do gradiente de pressão, o sentido do escoamento desta mistura, em relação ao cilindro, se inverte no período compreendido entre cerca de 60° e 140° de virabrequim. Após 140° , em decorrência da elevação do

gradiente de pressão causada pela abertura da válvula de escapamento, o escoamento médio passa a ser novamente ascendente.

Essas variações provocam mudanças na espessura da camada limite, causando um acúmulo dessa próximo ao cabeçote, uma redução da espessura da camada na região intermediária, e um novo acúmulo nas regiões próximas ao PMI. Isto evidencia a importância de se considerar o transporte convectivo na direção axial, no estudo da difusão e reação dos hidrocarbonetos.

6.1 Cálculo da Espessura da Camada Limite e da Injeção de Massa

Após a elaboração de modelo bidimensional e transiente da formação da camada limite de mistura combustível não queimada adjacente à parede do cilindro, com o correspondente sistema de equações diferenciais explicitadas em termos de diferenças finitas, seguiu-se sua implementação num programa computacional em linguagem FORTRAN. No apêndice B1 é apresentada a listagem do programa.

Para a execução do programa foram necessários cálculos preliminares e levantamento de dados complementares.

Dados sobre a geometria do motor foram obtidos a partir de informações junto à montadora (dimensões do pistão, cilindro, biela, diagrama de válvulas, entre outros) e aos fabricantes do pistão e dos anéis (dimensões e folgas na região dos anéis e canaletes levaram à estimativa do volume total de frestas de $0,92 \text{ cm}^3$).

Valores de parâmetros operacionais do motor e características físico-químicas dos gases combustíveis foram obtidos a partir de medições realizadas nos laboratórios do IPT, assim como em consulta à literatura.

Os dados de controle sobre a execução do programa, como passos de integração e método de discretização das equações diferenciais, foram objeto de avaliação

preliminar para melhor adequar o fenômeno analisado com a capacidade computacional disponível (microcomputador *Pentium*) e com o grau de precisão e convergência do método de cálculo numérico empregado.

Verificou-se que a utilização direta da curva de pressão dentro do cilindro como dado de entrada, mesmo filtrada - tratamento de média móvel sobre a curva original adquirida, se mostrou imprópria por gerar flutuações indesejadas nos perfis das camadas limites resultantes dos cálculos.

Partindo de pontos de referência nas curvas medidas e de relações termodinâmicas, procedeu-se a um ajuste da evolução da pressão para as condições de operação simuladas, sendo estas curvas ajustadas utilizadas como dado de entrada na simulação computacional.

Na figura 6.2 são apresentadas as curvas medida e ajustada da pressão no cilindro, assim como suas derivadas - razão de elevação de pressão, para a operação de metano (gás A) a plena potência (2800 rpm - 100% de carga).

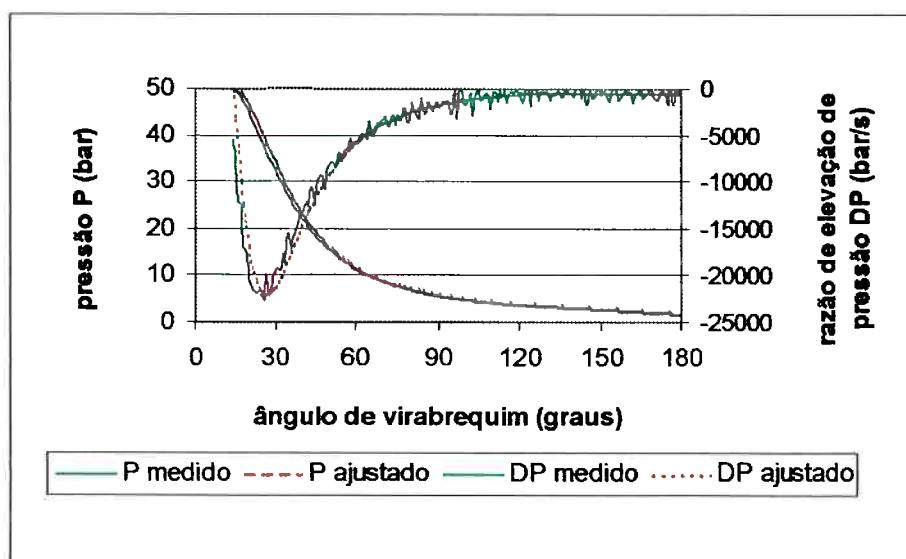


Fig. 6.2 - Ajuste da pressão e razão de elevação da pressão no cilindro.

Como já mencionado, o modelo bidimensional de formação da camada limite envolveu inicialmente o equacionamento do desenvolvimento do perfil do fluxo de saída de mistura combustível das frestas, modelado na forma de jato.

Tendo o pistão como referencial, a figura 6.3 apresenta os perfis da camada limite do "jato" - espessura y_E em função da distância axial do pistão ao cabeçote - para diferentes instantes; na figura, cada curva está associada a intervalo de tempo correspondente a 10° de virabrequim e estão assinaladas as curvas referentes aos instantes de 40° , 80° e 140° após o PMS.

Para facilidade de entendimento vale esclarecer que, por exemplo, a curva assinalada 80° representa o perfil instantâneo da camada limite no tempo correspondente a 80° após o PMS (para operação a 2800 rpm, cerca de 4,8 ms após o PMS), quando então o topo do pistão ($x = 0$) está a uma distância de aproximadamente 77 mm da parede do cabeçote (abscissa do final da curva).

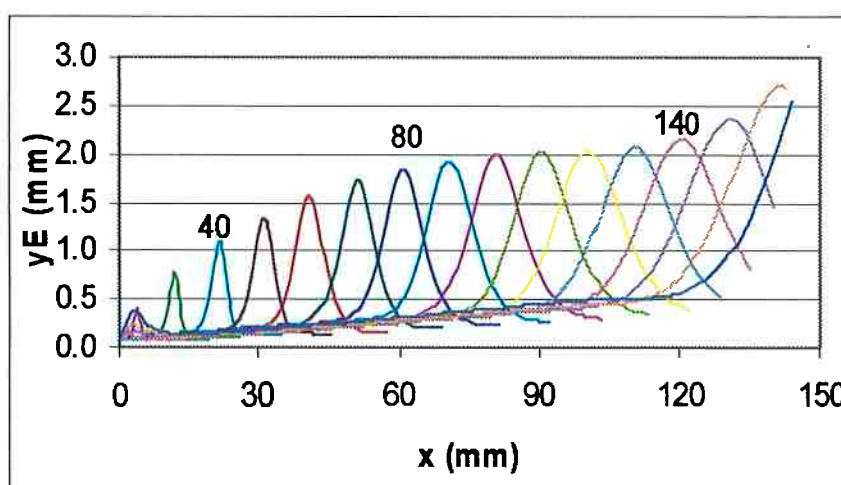


Fig. 6.3 - Perfis instantâneos da camada limite do "jato", para cada 10° de virabrequim.

Nota-se nos perfis um acúmulo de massa, formando um pico numa região intermediária, que se situa mais próximo ao pistão, ou não, dependendo do balanço entre os efeitos da velocidade média de saída das frestas e da velocidade instantânea do pistão, conforme explicado no início do capítulo e ilustrado na figura 6.1.

O perfil correspondente a 170° de virabrequim (curva à direita, ainda em elevação) apresenta também um segundo pico próximo ao pistão ($x \sim 5$ mm), ilustrando as variações de direção do fluxo da camada limite.

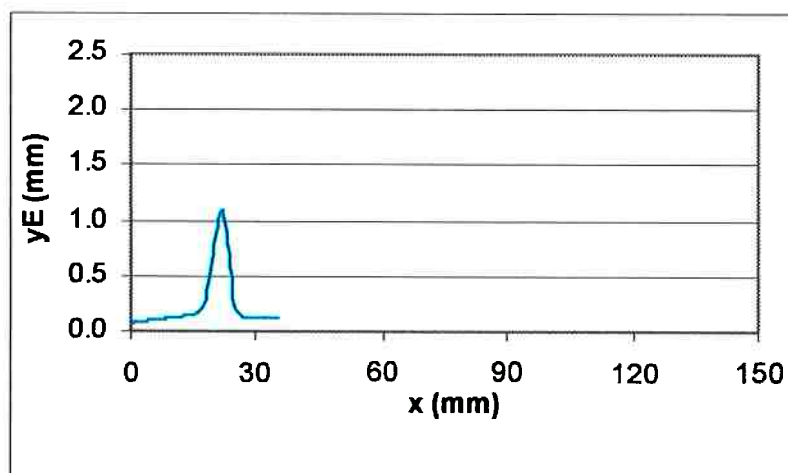
Os resultados obtidos com relação aos perfis das velocidades axiais $u(x, \eta, t)$, a partir da saída das frestas, permitiram um exame mais detalhado da evolução do comportamento da camada limite.

Tomando a título de ilustração as curvas assinaladas na figura 6.3, pode-se representar para cada uma delas o perfil da velocidade u em diferentes seções do cilindro.

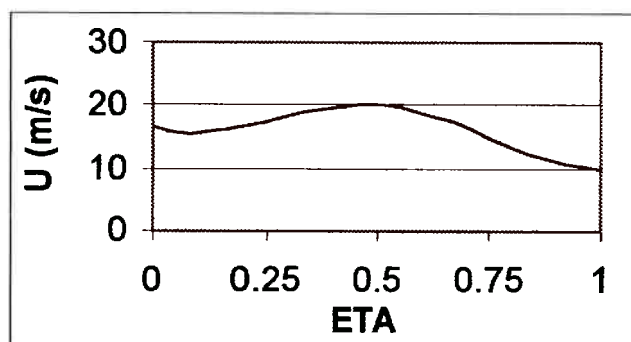
Na figura 6.4 está representado novamente o perfil da camada limite associado ao instante 40° após o PMS, juntamente com o perfil de u em função da coordenada normal à parede η , para a posição no cilindro $x = 20$ mm, que corresponde aproximadamente à espessura máxima dessa camada.

O mesmo critério se repete para as figuras 6.5 e 6.6, com relação às curvas 80° e 140° , respectivamente.

Na figura 6.6 além de estar representado o perfil na posição associada à espessura máxima da camada limite, pode-se ver o perfil de u na mesma posição apresentado na figura 6.5 (b), porém num instante posterior. Tem-se assim, um quadro das variações bidimensionais e no tempo dessa velocidade.



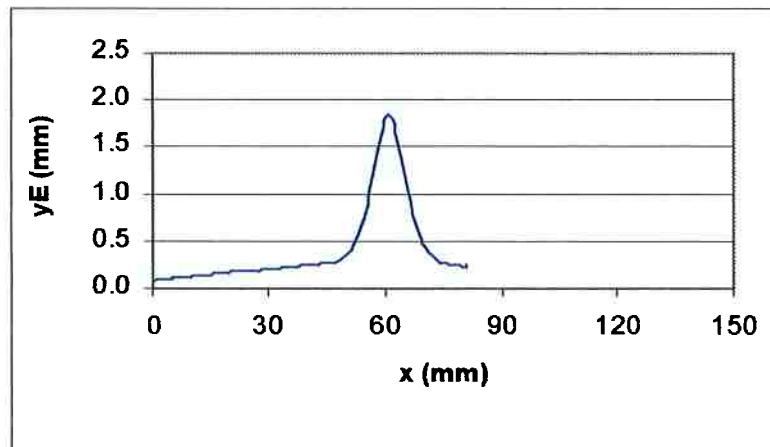
(a)



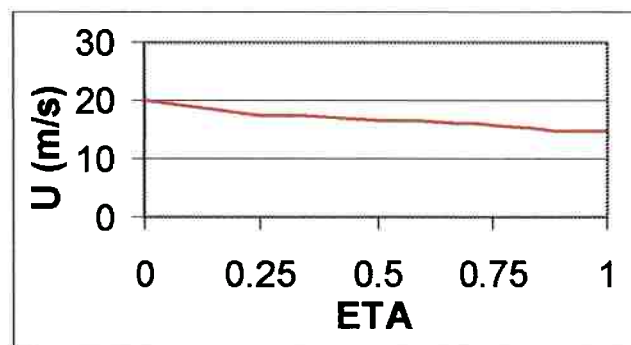
(b)

Fig.6.4 -(a) Perfil da camada limite no instante correspondente a 40° após o PMS;

(b) Perfil da velocidade u na posição $x=20$ mm (espessura máxima da camada).



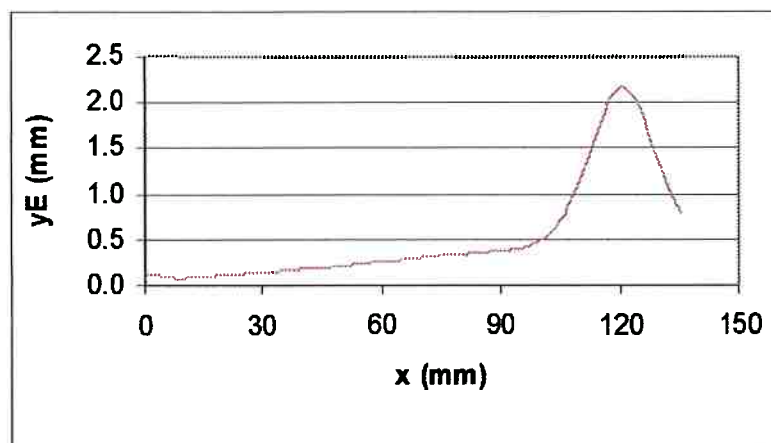
(a)



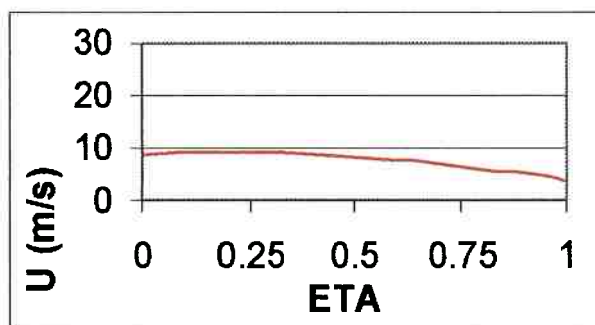
(b)

Fig.6.5 -(a) Perfil da camada limite no instante correspondente a 80° após o PMS;

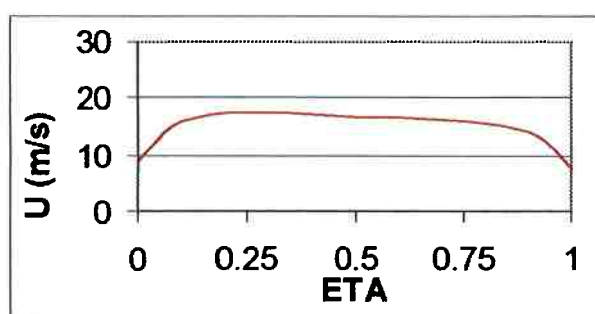
(b) Perfil da velocidade u na posição $x=60\text{mm}$ (espessura máxima da camada).



(a)



(b)



(c)

Fig.6.6 -(a) Perfil da camada limite no instante correspondente a 140° após o PMS;

(b) Perfil da velocidade u na posição $x=60\text{mm}$ (mesma posição da fig. 6.5 b);

(c) Perfil da velocidade u na posição $x=120\text{mm}$ (espessura máxima da camada).

Considerando a condição de contorno no desenvolvimento do equacionamento da camada limite, na qual em $\eta = 0$, u assume o valor da velocidade instantânea do pistão, vê-se que na região do máximo da espessura da camada, quando do início do curso de expansão e, novamente no instante próximo ao PMI (figuras 6.4 e 6.6, respectivamente) a velocidade u supera em quase todo o perfil a velocidade do pistão, indicando fluxo no sentido do cabeçote. Enquanto que na figura 6.5, região intermediária, o fluxo de saída das frestas está ligeiramente voltado para o sentido inverso, uma vez que u se apresenta pouco menor do que a velocidade do pistão em todo o perfil, que praticamente se repete num instante posterior - figura 6.6 (b).

Como visto até o momento, longe das posições de valor máximo de espessura da camada limite, a velocidade do fluxo de saída das frestas tem valores mais representativos em relação ao cilindro, do que em relação ao pistão. Considerando adicionalmente a abordagem unidirecional de difusão e oxidação, na direção normal à parede do cilindro, optou-se por considerar o referencial no cilindro para o tratamento de fenômeno de transporte e reação dos hidrocarbonetos das frestas.

Tendo agora como referencial o cilindro, as curvas apresentadas na figura 6.7 representam a evolução no tempo da espessura da camada limite, formada a partir do jato de saída das frestas, para cada posição do cilindro, espaçadas da distância de 5 mm; note-se que cada curva tem sua origem no ângulo de virabrequim tal, que corresponde à posição do pistão na seção considerada do cilindro, quando o jato deixa a fresta.

A condição de operação do motor é a mesma que originou as curvas das figuras anteriores, isto é, metano a plena carga na rotação de 2800 rpm.

As primeiras curvas, correspondentes à evolução no tempo das espessuras das camadas de mistura que deixam as frestas estando o pistão próximo ao PMS, se mostram mais complexas, apresentando dois picos, indicando as variações de sentido do fluxo total de

mistura, ora acumulando massa nessas seções do cilindro, ora adelgando a espessura das camadas. Estas seções, porém, apresentam maior acúmulo de massa quando comparadas com as seções mais afastadas do cabeçote, remetendo ao fenômeno explanado no início do capítulo.

Pelo fato da denominada camada de expansão ser tratada como uma camada adjacente à parede do cilindro, inicialmente em repouso, sua evolução no tempo é ditada simplesmente pelo efeito de descompressão no cilindro. As curvas que mostram esta evolução para varias seções do cilindro ($\Delta x = 5 \text{ mm}$) são apresentadas na figura 6.8, correspondendo às mesmas condições da figura 6.7.

O cálculo do fluxo de massa a ser injetado (positivo) ou retirado (negativo) através da parede para cada seção do cilindro, decorreu diretamente dos resultados das evoluções de ambas camadas limites representadas nas figuras 6.7. e 6.8. A expressão usada para a determinação deste fluxo se encontra na eq. (5.26), sendo que na figura 6.9 estão representadas a evolução das quantidades de ajuste de massa, para cada seção do cilindro, por unidade de área.

Sob o ponto de vista do modelo de pós oxidação dos hidrocarbonetos das frestas, objetivo último do trabalho, torna-se importante analisar as curvas de evolução da massa de ajuste referentes às últimas seções do cilindro, uma vez que próximo ao PMS praticamente toda a mistura que deixa a região das frestas sofre completa combustão (altas temperaturas dos gases queimados no cilindro).

Da figura 6.9 infere-se que para as seções do cilindro de interesse para o modelo de pós oxidação, curvas cujas origens estão relacionadas a maiores ângulos de virabrequim, tem-se injeção considerável de massa na camada limite (valores positivos elevados), indicando que, ao se permitir expansão bidimensional da mistura das frestas, ocorre acúmulo de massa na região próxima ao PMI (final do curso de expansão),

associado ao segundo pico na espessura da camada limite do jato, mencionado quando dos comentários a respeito das figuras 6.1 e 6.3.

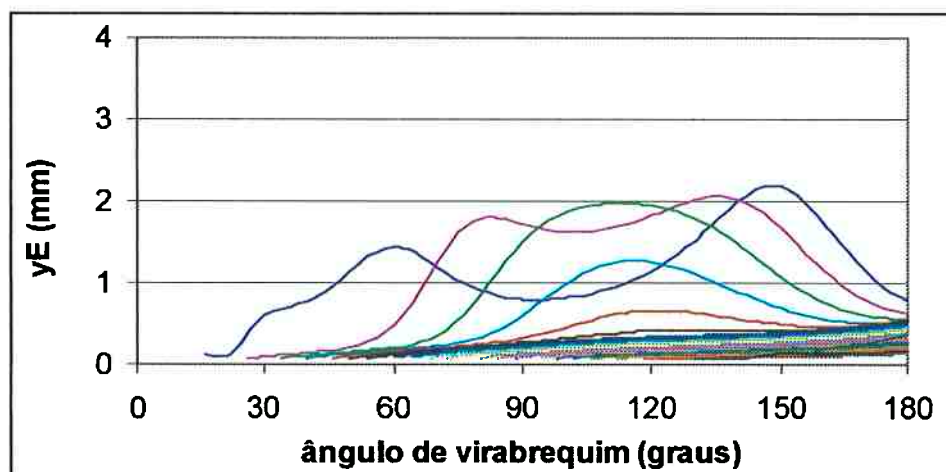


Fig. 6.7 - Evolução da espessura da camada limite do jato, originada em diversas seções do cilindro ($\Delta x = 5$ mm).

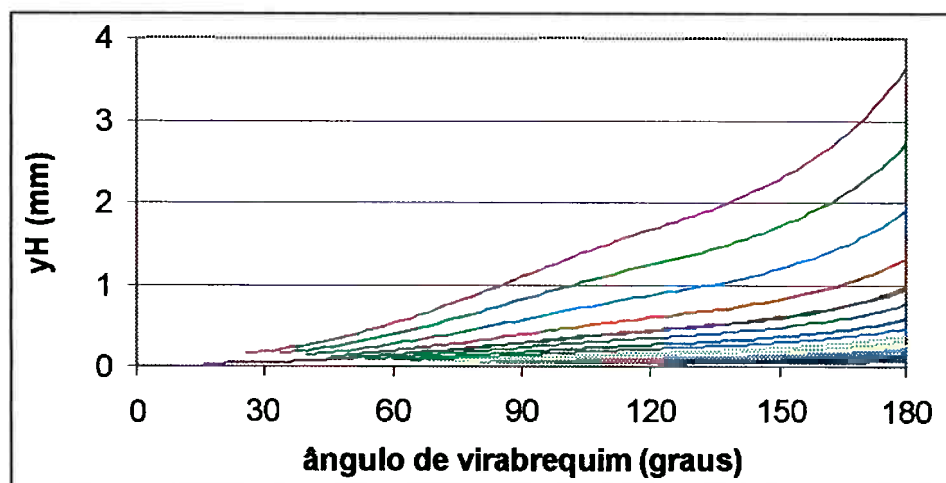


Fig. 6.8 - Evolução da espessura da camada de expansão, originada em diversas seções do cilindro ($\Delta x = 5$ mm).

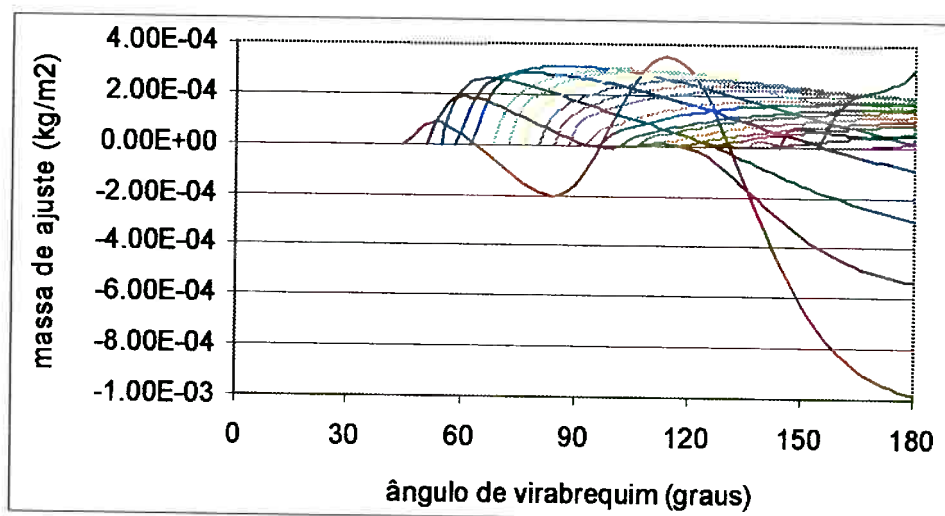


Fig. 6.9 - Evolução da massa de ajuste, para diversas seções do cilindro ($\Delta x = 5$ mm).

6.2 Simulação da Formação de Hidrocarbonetos

O programa computacional referente à solução numérica do equacionamento unidimensional que descreve os fenômenos de troca de massa, calor e espécies químicas entre a camada limite com injeção de massa através da parede e os gases a altas temperaturas no interior do cilindro, é apresentado no apêndice B2.

Vários cálculos complementares ao programa de formação de hidrocarbonetos tiveram que ser previamente executados, para serem utilizados como dados de entrada neste.

Tanto a evolução da pressão no cilindro, quanto a evolução da temperatura, são dados de entrada no programa. Como já mencionado, a curva da pressão medida necessitou ser ajustada a partir de relações termodinâmicas.

Os valores de temperatura no núcleo de gases queimados, para cada instante do ciclo, foram calculados através de programa de simulação termodinâmica para o ciclo de trabalho de motor a gás; estes dados de temperatura também passaram por um ajuste,

resultando numa curva mais adequada e ainda representativa para a leitura no programa.

O programa de cálculos auxiliares, apresentado no apêndice B3 em linguagem FORTRAN como os demais, traz além do método empregado para ajuste das curvas de pressão e temperatura, os cálculos dos parâmetros de difusão turbulenta.

Como resultado do cálculo computacional, obtém-se os perfis da temperatura e das concentrações de metano e de oxigênio na direção normal à parede, para cada grau de virabrequim, em diversas seções do cilindro.

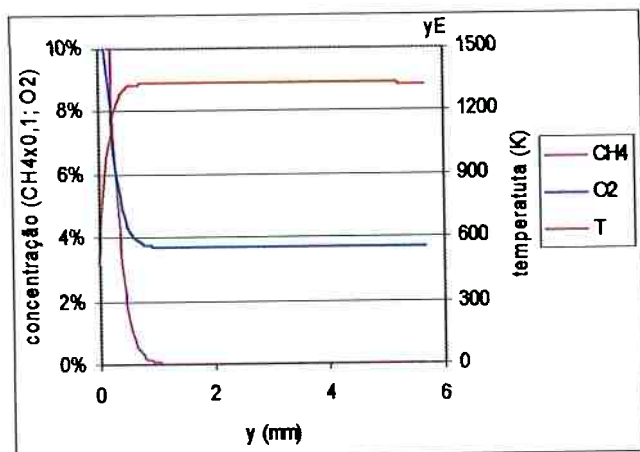
A figura 6.10 apresenta estes perfis em quatro diferentes instantes (110° ; 130° ; 150° e 175° após o PMS), para a seção no cilindro, na qual cerca de 50% da massa de hidrocarbonetos que emergiu das frestas sofreu oxidação.

A título de análise comparativa são apresentados na figura 6.11 os perfis para a mesma situação, porém não considerando massa injetada através da parede.

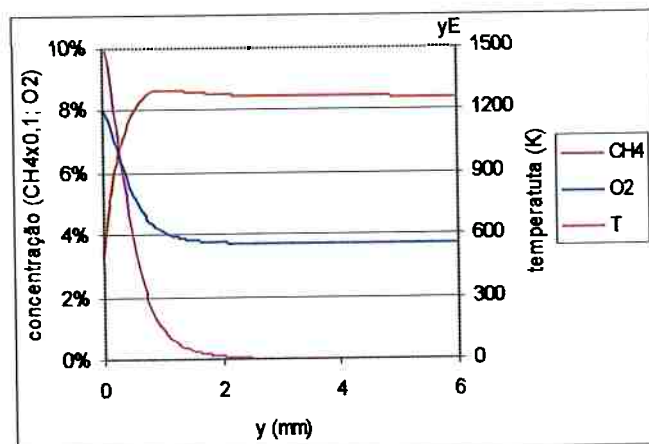
Ambas as situações calculadas se referem ao caso base – gás A operando a plena carga e 2800 rpm.

É importante que o número de pontos empregados para o cálculo dos perfis N_y , na direção normal à parede, seja suficientemente grande, varias vezes maior do que a espessura da camada limite, de modo a não causar interferência nos parâmetros no interior desta. No caso apresentado nas figuras 6.10 e 6.11 foram utilizados 600 pontos de cálculo, enquanto que a camada limite ocupou os 20 primeiros pontos.

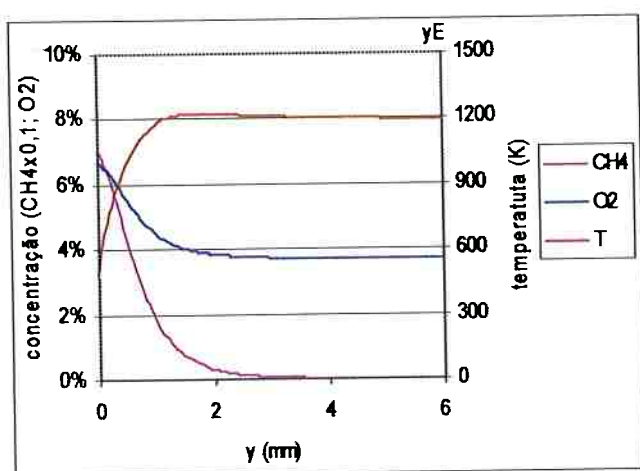
De forma a avaliar a suficiência do número total de pontos, foram refeitos os cálculos para $N_y = 300$ e os perfis resultantes para o instante correspondente a 175° após o PMS (situação mais crítica) são apresentados na figura 6.12.



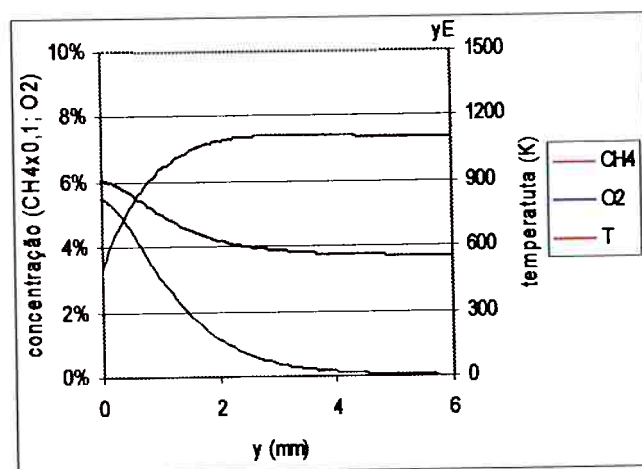
(a) 110° após o PMS



(b) 130° após o PMS

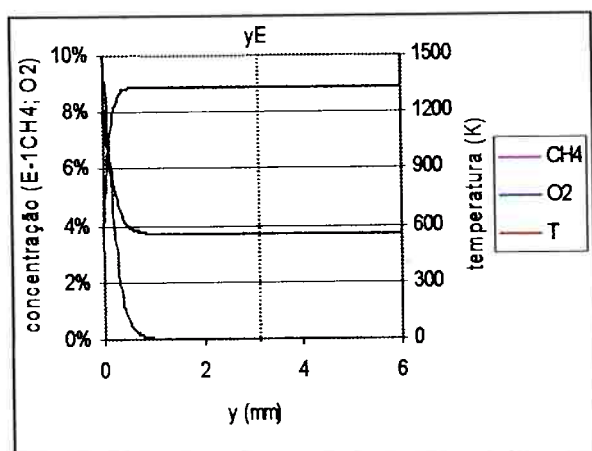


(c) 150° após o PMS

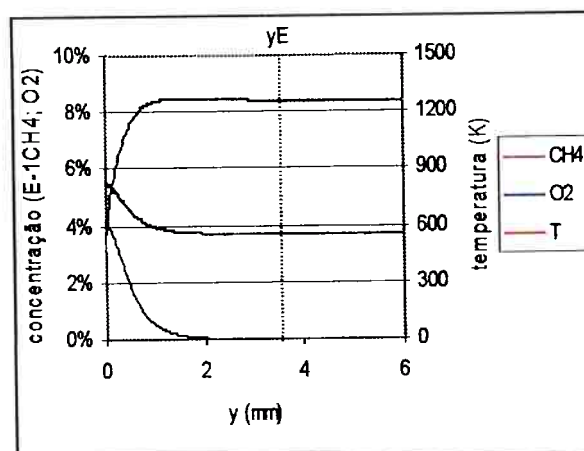


(d) 175° após o PMS

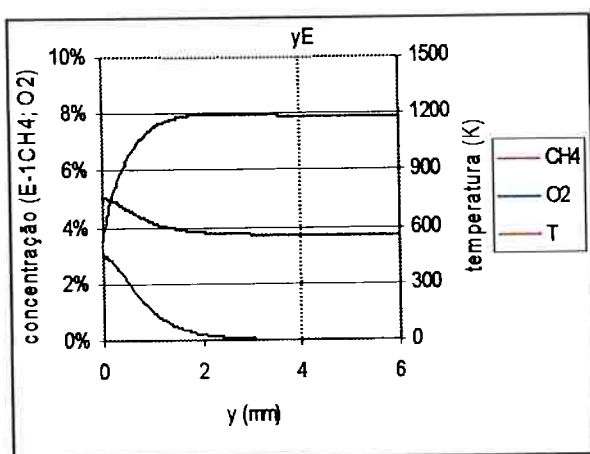
Fig. 6.10 - Perfis da temperatura e das concentrações de metano e oxigênio, para diversos instantes; GÁS A ~ 50% de queima - camada limite do jato.



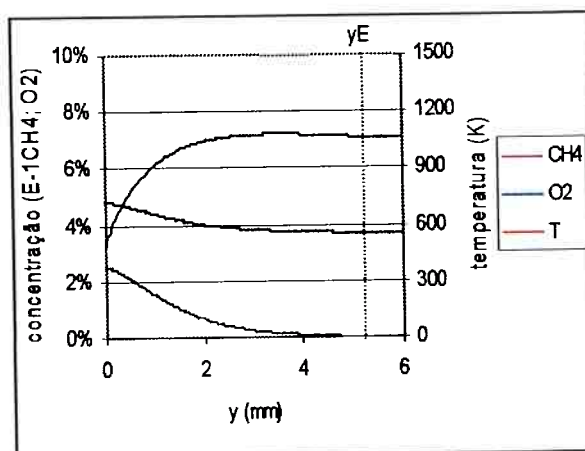
(a) 110° após o PMS



(b) 130° após o PMS



(c) 150° após o PMS



(d) 175° após o PMS

Fig. 6.11 - Perfis da temperatura e das concentrações de metano e oxigênio, para diversos instantes; GÁS A ~ 50% de queima - camada limite de expansão.

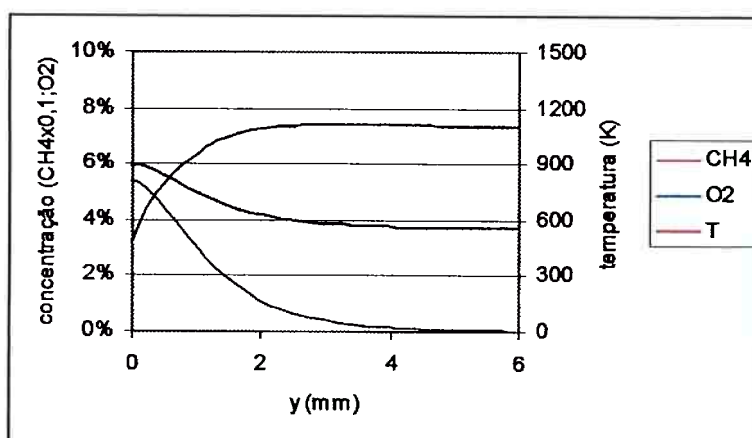


Fig. 6.12 - Perfis da temperatura e das concentrações de metano e oxigênio, repetindo condição da fig. 6.10 (d), 175° após o PMS, com $N_y = 300$.

Comparando as figuras 6.12 e 6.10 (d), conclui-se que a opção de $N_y = 600$ se apresentou adequada para o problema em questão, pois mesmo com $N_y = 300$ (figura 6.12) os valores das tangentes das concentrações das espécies e da temperatura, na interface entre camada limite e núcleo de gases queimados permaneceram nulos.

Os cálculos de transporte e reação dos hidrocarbonetos das frestas foram executados desde o ângulo correspondente ao pico de pressão, quando a partir desse instante se inicia o processo de decompressão, ocasionando o fluxo de retorno ao cilindro do HC retido nas frestas, e se estenderam até o PMI. No entanto, pelo fato da pressão no cilindro continuar decaindo após este ponto, já no curso de exaustão, considerou-se a quantidade de massa de saída das frestas até o valor mínimo de pressão, como uma parcela que contribui integralmente para as emissões, uma vez que a temperatura

relativamente baixa nesta fase do ciclo, associada ao tempo de permanência no cilindro insuficiente, já não permite que se observe reações de oxidação dos hidrocarbonetos.

Os cálculos de simulação foram executados para cada seção do cilindro, assim definida: a distância do pistão no PMI ao cabeçote foi dividida em 29 partes iguais, resultando num $\Delta x = 5$ mm, correspondente à cada seção considerada.

Análise comparativa entre os perfis das concentrações, com e sem injeção de massa (figuras 6.10 e 6.11, respectivamente), relacionadas à mesma seção de referência no cilindro, quadro a quadro (mesmos instantes), permite observar que a influência da injeção de mistura na camada limite se dá nas proximidades da parede do cilindro, afetando diretamente as concentrações de metano e oxigênio nestas regiões.

Comportamento observado em todos os gráficos, porém mais evidenciado na figura 6.10 (b), leva à associação das reações de oxidação (reduções bruscas, próximas às paredes, nas concentrações de metano e oxigênio) com a elevação da temperatura na camada limite reativa, acima do valor no núcleo de gases no cilindro, devido à liberação de energia provocada por estas reações.

Como no início do curso de expansão, toda a massa não queimada que emerge das frestas é imediatamente consumida por oxidação, devido às elevadas temperaturas dos gases no cilindro, a análise da simulação se concentrou nos dados que indicaram efetiva contribuição para as emissões de hidrocarbonetos.

Quando os perfis instantâneos das concentrações de metano, para cada seção do cilindro, foram integrados, resultaram em curvas da evolução no tempo da oxidação dos hidrocarbonetos, ou como mostrado nas figuras 6.13 e 6.14, em curvas da evolução dos valores em massa de hidrocarbonetos que deixam as frestas e da massa que permanece não queimada no cilindro.

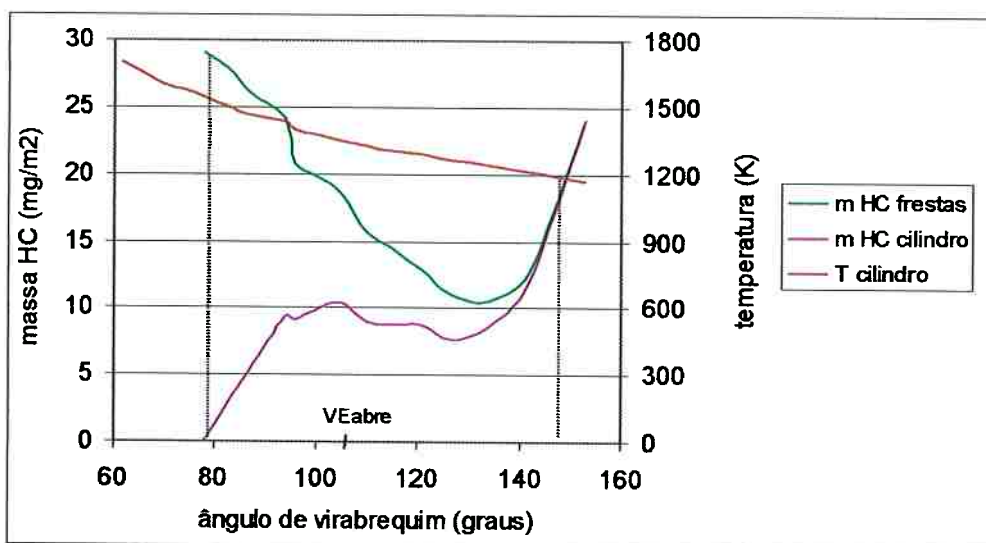


Fig. 6.13 - Evolução da temperatura e das massas de HC das frestas e de HC não queimado no cilindro; gás A - 2800 rpm e 100% de carga.

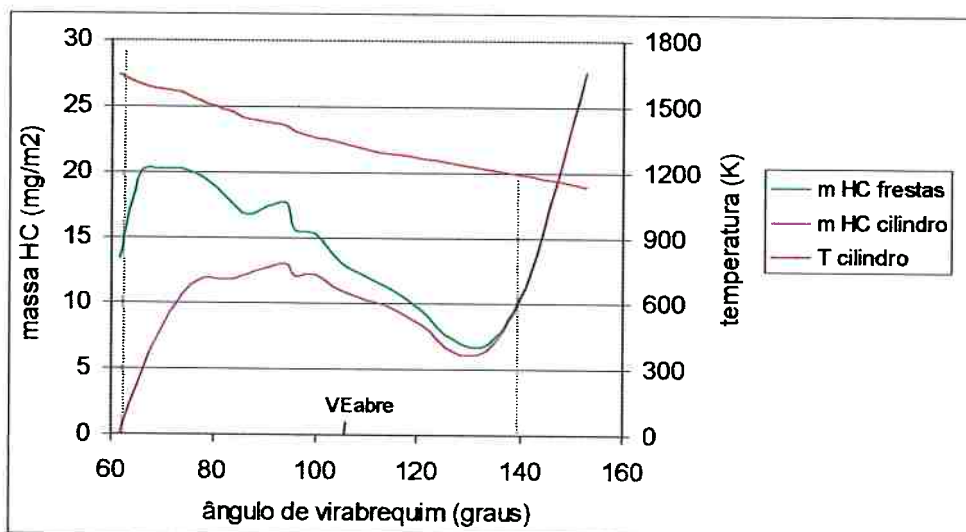


Fig. 6.14 - Evolução da temperatura e das massas de HC das frestas e de HC não queimado no cilindro; gás A - 2800 rpm e 50% de carga.

Como se depreende das curvas mostradas na figura 6.13, apenas os gases que emergiram das frestas a partir de cerca de 80° de virabrequim após o PMS apresentaram parcelas de massa que não participaram das reações de pós oxidação, contribuindo dessa forma para as emissões de HC. Tal ponto de transição se mostra diretamente ligado à influência da temperatura dos gases queimados no cilindro (curva também apresentada na figura) na cinética de reação. No caso em questão, temperaturas abaixo de 1540 K, já ocasionariam parcelas de hidrocarbonetos não queimados.

Por outro lado, para valores de temperatura no cilindro abaixo de 1200 K, correspondendo no caso a cerca de 150° após o PMS, verificou-se baixo nível de oxidação dos hidrocarbonetos, durante o período de tempo disponível para o processo de difusão e reação.

O efeito da temperatura dos gases queimados sobre os níveis de oxidação pôde ser avaliado através de comparação com o motor operando a 50% de carga, mantendo-se constante a rotação e o gás combustível. Os resultados estão apresentados na figura 6.14.

Observa-se na referida figura que já ao redor de 60° após o PMS, portanto na primeira metade do curso de expansão, parcela detectável de HC das frestas não participou das reações. No entanto, a temperatura reinante no cilindro, cerca de 1620 K, estava próxima ao valor observado na condição de plena carga, isto é, à temperatura mínima associada à oxidação completa dos hidrocarbonetos das frestas.

Comportamento similar pode ser observado de análise comparativa entre as figuras 6.13 e 6.14, com relação à temperatura, na qual o nível da razão de reação é insuficiente, no tempo disponível para o processo, fazendo com que toda mistura que

deixa as frestas, permaneça não queimada dentro do cilindro; ambas estão próximas a 1200 K, embora o fenômeno se dê em diferentes instantes.

Cabe observar que nas simulações efetuadas, nas diferentes condições de operação, os valores encontrados para a temperatura na qual ainda ocorrem reações de oxidação do metano, situados em torno de 1200 K, são inferiores àqueles mencionados na literatura que consideram o mecanismo completo de cinética química, cerca de 1500 K para metano (WU *et al.*, 1995).

Para se obter o total de massa de hidrocarbonetos que permaneceu no cilindro ao final do processo de expansão, os valores referidos a cada seção do cilindro, já integrados no tempo, foram multiplicados pelo trecho correspondente à cada seção do cilindro considerada e pelo perímetro do cilindro, resultando no valor total por ciclo de trabalho do motor, que corresponde à integração no tempo das curvas que indicam a evolução da massa de HC não queimada no cilindro, nas figuras 6.13 e 6.14 .

O efeito da variação de parâmetros de operação do motor e composição do gás natural na formação de hidrocarbonetos, foi avaliado através de simulação de quatro diferentes condições. Além do caso base, foram calculados os valores do total de massa de HC no cilindro, quando variada a rotação e carga de operação e alimentando o motor com gás combustível constituído de mistura metano-etano (gás B). A tabela 6.1 apresenta os resultados da simulação.

Uma primeira constatação a partir de análise da tabela 6.1, diz respeito à significativa variação entre os dados simulados sem e com injeção de massa pela parede, estes últimos representando mais adequadamente os dados de ensaios. Indicação, portanto, de que transporte axial entre as seções do cilindro devem ser consideradas no modelo de difusão e reação dos hidrocarbonetos.

Os dados de simulação apresentaram tendências coerentes com relação às variações operacionais do motor e indicaram que o modelo simulador respondeu às variações de evolução da temperatura no cilindro, representadas pela mudança de combustível, mantendo as mesmas condições de carga e rotação do caso base.

Tabela 6.1 - Resumo dos resultados de simulação.

condições de operação	GÁS A			GÁS B
	2800 rpm 100% carga	2800 rpm 50% carga	1680 rpm 100% carga	2800 rpm 100% carga
MEDIÇÃO				
CH4 no escape (mg/ciclo)	0,274	0,202	0,354	0,075
relação emissão/admissão CH4 (% em massa)	0,73	0,89	0,71	0,44
SIMULAÇÃO				
CH4 não queimado no cilindro sem injeção de massa (mg/ciclo)	0,062	0,060	0,074	0,022
relação CH4 não queimado no cil./admiss.- sem injeção (% massa)	0,17	0,26	0,15	0,13
CH4 não queimado no cilindro com injeção de massa (mg/ciclo)	0,171	0,256	0,175	0,050
relação CH4 não queimado no cil./admiss.- com injeção (% massa)	0,46	1,12	0,35	0,30

Os dados apresentados na tabela indicam que em geral, exceção para a operação em carga parcial, as frações de metano que permaneceram não queimadas no cilindro foram subestimadas. Tal constatação, reforçada pelo fato de terem sido encontrados na simulação valores relativamente baixos de temperatura mínima de oxidação, leva à

consideração de que a razão de queima dos hidrocarbonetos possa ter sido superestimada, provavelmente em decorrência do emprego de uma relação global de oxidação do metano, não propriamente adequada para as faixas de temperatura e pressão do ciclo de trabalho de motores de combustão interna.

O emprego de uma relação global mais compatível com as condições de operação do motor, não superestimando a razão de reação do metano, possivelmente provocará uma elevação dos valores calculados de HC no cilindro, tornando-os mais condizentes com os experimentos, com provável exceção para cargas parciais.

Com relação a estas condições de operação, para o motor em estudo constatou-se que ao final do curso de exaustão, justamente na emissão de grande parte do HC que foi "raspado" das paredes do cilindro, as pressões internas se encontravam menores do que a pressão atmosférica, ocorrendo portanto fluxo de retorno. E como o modelo não considera o fenômeno de exaustão, ou melhor, de expulsão do HC no cilindro, são esperados maiores valores simulados em relação aos medidos, na operação em cargas parciais.

7. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Através do desenvolvimento de um modelo unidimensional e transiente da formação e emissão de hidrocarbonetos em motores de ignição por centelha, foi possível adquirir maior conhecimento a respeito dos mecanismos de formação, transporte e pós oxidação da mistura combustível proveniente das frestas da câmara de combustão, consideradas neste trabalho fonte preponderante de hidrocarbonetos não queimados nos motores a gás natural.

A contribuição diferenciada do presente modelo está na consideração, em conjunto, do transporte de massa na direção axial do cilindro, entre as seções transversais ao longo da camada limite formada pelos hidrocarbonetos das frestas, e do transporte difusivo na direção normal à parede do cilindro.

A simulação realizada para diferentes condições de operação de motor a gás natural, utilizado em frotas de ônibus urbanos, mostrou ser importante considerar o transporte axial entre as seções do cilindro no modelo de difusão e reação dos hidrocarbonetos das frestas, pois com esta implementação os resultados de simulação representaram mais adequadamente os dados experimentais.

Os resultados da simulação apresentaram tendências coerentes com relação às variações operacionais do motor (carga e rotação) e indicaram que o modelo simulador respondeu às variações de evolução da temperatura no cilindro, representadas pela mudança de gás combustível.

Análise comparativa com dados experimentais indicaram que em geral, exceção para a operação em carga parcial, as frações de metano que permaneceram não queimadas no cilindro foram subestimadas. Tal constatação, reforçada pelo fato de terem sido encontrados na simulação valores relativamente baixos de temperatura mínima de

oxidação, leva à consideração de que a razão de queima dos hidrocarbonetos possa ter sido superestimada, provavelmente em decorrência do emprego de uma relação global de oxidação do metano, não propriamente adequada para as faixas de temperatura e pressão do ciclo de trabalho de motores de combustão interna.

Tendo em vista que o presente estudo se insere no escopo mais amplo de simular numericamente o desempenho, consumo e emissões de poluentes de motores a gás natural de ignição por centelha, recomenda-se, a título de ampliação e aperfeiçoamento deste trabalho, o ajuste de uma equação global de reação do metano, na faixa de interesse da operação de motor a gás natural, partindo do mecanismo completo de cinética química. À esta relação global da razão de oxidação irreversível do metano, seria implementada uma equação global ajustada para a oxidação reversível do monóxido de carbono, pois a consideração de um modelo simplificado de cinética química em dois estágios certamente trará melhoria ao modelo de formação de hidrocarbonetos.

Uma abordagem mais detalhada dos fenômenos aqui apresentados poderia ser alcançada através do equacionamento bidimensional dos processos de transporte e oxidação dos hidrocarbonetos das frestas, seguida de ampla avaliação da robustez do modelo assim implementado, a partir da simulação e experimentos envolvendo variações de outros parâmetros operacionais do motor a gás como avanço de ignição, relação ar combustível, temperatura do fluido refrigerante, entre outros.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABNT. Motores alternativos de combustão interna de ignição por compressão (Diesel) ou ignição por centelha (Otto) de velocidade angular variável - Ensaio. **NBR 5484/1985**, São Paulo, 1985.
- ABNT. Determinação da emissão do gás de escapamento emitido por motor Diesel. **NBR 10813/1993**, São Paulo, 1993.
- ALKIDAS, A. C. The Influence of Partial Suppression of Heat Rejection on the Performance and Emissions of a Divided-Chamber Diesel Engine. **SAE Paper 860309**, p.1-11, 1986.
- ANGELBERGER, C.; POINSOT, T.; DELHAY, B. Improving Near-Wall Combustion and Wall Heat Transfer Modeling in S.I. Engine Computations. **SAE Paper 972881**, p. 113-130, 1997.
- ANNAND, W. J. D. ; MA, T. H. Instantaneous Heat Transfer to the Cylinder Head Surface of a Small Compression-Ignition Engine. **Proc. Inst. Mech. Eng.**, 185, p. 976-987, 1971.
- ASTM Standard Practice for Calculating Heat Value, Compressibility Factor, and Relative (Specific Gravity) of Gaseous Fuel. **ASTM - D 3588 - 91**, 1991.
- BARGENDE, M. ; WOSCHNI, G. ; HOHENBERG, G. F. Ein Gleichungsansatz zur Berechnung der Instationaeren Wandwaermeverluste bei Ottomotoren. **Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors - Seminar 91** , T U Graz, p. 171-190, 1991.
- BARITAUD, T. A. ; DUCLOS, J. M. ; FUSCO, A. Modeling Turbulent Combustion and Pollutant Formation in Stratified Charge S.I. Engines. **26th Int. Symp. on Combustion**, p. 2627-2635, 1996.
- BLIZARD, N. S. ; KECK, J. C. Experimental and Theoretical Investigation of Turbulent Burning Model for Internal Combustion Engines **SAE Paper 740191**, 1974.

- BOHAC, S. V. ; BAKER, D. M. ; ASSANIS, D. N. A Global Model for Steady State and Transient S.I. Engine Heat Transfer Studies. **SAE Paper 960073**, p.39-57, 1996.
- BOSCHAN, E. et al. Effect of gas quality changes on gas engine emission. **International Gas Research Conference, Proceedings** , USA, 1989.
- BOWMAN, C. T. Kinetics of pollutant formation and destruction in combustion. **Prog. Energy Combust. Sci.**, v. 1, p. 33-45, 1975.
- CARTELLIERI, W. ; CHMELA, F. G. ; KAPUS, P. E. ; TATSCHL, R. M. Mechanisms Leading to Stable and Efficient Combustion in Lean Burn Gas Engines. The Third International Symposium on **Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines**, p. 17-31, Japan, 1994.
- CHENG, W. K. et al. An Overview of Hydrocarbon Emissions Mechanisms in Spark-Ignition Engines. **SAE Paper 932708** p. 1-14, 1993.
- CHEUNG, H. M. ; HEYWOOD, J. B. Evaluation of a One-Zone Burn-Rate Analysis Procedure Using Production S. I. Engine Pressure Data. **SAE Paper 932749**, p. 1-12, 1993.
- CORBO, P. ; Gambino, M. et al. Comparison between Lean-Burn and Stoichiometric Technologies for CNG Heavy-Duty Engines. **SAE Paper 950057**, p. 1-4, 1995.
- DAGAUT, P. ; BOETTNER, J. C. ; CATHONNET, M. Methane Oxidation: Experimental and Kinetic Modeling Study. **Combustion Science and Technology**, v. 77, p. 127-148, 1991.
- DURBIN, E. J. Understanding emissions levels from vehicle engines fueled with gaseous fuels. Paper of **Department of Mechanical and Aerospace Engineering**, Princeton University, p. 1-27, 1989.
- ENG, J. A. ; LEPPARD, W. R. et al. Experimental Hydrocarbon Consumption Rate Correlations from a Spark Ignition Engine. **SAE Paper 972888**, p. 41-62, 1997a.
- ENG, J. A. ; LEPPARD, W. R. et al. The Interaction between Nitric Oxide and Hydrocarbon Oxidation Chemistry in a Spark Ignition Engine. **SAE Paper 972889**, p. 63-79, 1997b.

- FERGUSON, C. R. **Internal Combustion Engines – Applied Thermosciences.** John Wiley & Sons, New York, 1986.
- FRANK, R. M. ; HEYWOOD, J. B. The Effect of Piston Temperature on Hydrocarbon Emissions from a Spark-Ignited Direct-Injection Engine. **SAE Paper 910558**, p. 91-99, 1997.
- FROLUND, K.; SCHRAMM, J. Simulation of HC-Emissions from SI-Engines - A Parametric Study. **SAE Paper 972893**, p. 115-132, 1997.
- GARDINER, W. C. ; BURCAT, A. **Combustion Chemistry.** Springer Verlag, New York, 1984.
- GOSMAN, A. D. Multidimensional Modeling of Cold Flows and Turbulence in Reciprocating Engines. **SAE Paper 850344**, p.137-153, 1985.
- GUEZENNEC, Y. G. ; HAMAMA, W. Two-Zone Heat Release Analysis of Combustion Data and Calibration of Heat Transfer Correlation in a I. C. Engine. **SAE Paper 1999-01-0218**, p. 1-17, 1999.
- HADJICONSTANTINO, N. ; MIN, K. ; HEYWOOD, J. B. Relation between Flame Propagation Characteristics and Hydrocarbon Emissions under Lean Operating Conditions in Spark-Ignition Engines. **26th Int. Symp. on Combustion**, p. 2637-2644, 1996.
- HAN, S. B. ; CHUNG, Y. J. et al. Empirical Formula for Instantaneous Heat Transfer Coefficient in Spark Ignition Engine. **SAE Paper 972995**, p.219-226, 1997.
- HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engine Fundamentals.** New York Ed. McGraw-Hill, 930 p., 1988.
- HIRES, S.D. ; TABACZYNSKI, R.J. ; NOVAK, J.M. The Prediction of Ignition Delay and Combustion Intervals for a Homogeneous Charge Spark - Ignition Engine. **SAE Paper 780232**, 1978.
- HOCHHAUSER, A. M. et al. Comparison of CNG and Gasoline Vehicle Exhaust Emissions: Mass and Composition - The Auto/Oil Air Quality Improvement Research Program. **SAE Paper 952507**, 1995.

- HOHENBERG, G. F. Berechnung des gaseitigen Wärmeüberganges in Dieselmotoren. **MTZ Motortechnische Zeitschrift**, 41 (7/8): 321-326, Jul/Aug. 1980.
- HOLLNAGEL C. Natural Gas Engine Mercedes-Benz M 447hG with Exhaust Emissions Lower than 50% Euro II. **SAE Paper 952289**, 1995.
- HUNTER, T. B. et al. The Oxidation of Methane at Elevated Pressures : Experiments and Modeling. **Combustion and Flame**, Vol. 97, p. 201-224, 1994.
- ISHIZAWA, S. An Experimental Study on Quenching Crevice Widths in the Combustion Chamber of a Spark-Ignition Engine. **26th Int. Symp. on Combustion**, p. 2605-2611, 1996.
- JOHANSSON, B. ; OLSSON, K. Combustion Chambers for Natural Gas SI Engines Part 1: Fluid Flow and Combustion. **SAE Paper 950469**, 1995a.
- JOHANSSON, B. ; OLSSON, K. Combustion Chambers for Natural Gas SI Engines Part 2: Combustion and Emissions. **SAE Paper 950517**, 1995b.
- KADOTA, T. et al. Combustion Process of Natural Gas in a Rapid Compression Combustor. In: **3rd. Int. Conference on Combustion Tech. for a Clean Environment**, Lisbon, 1995.
- KAISER, E. W. et al. Effect of Fuel Structure on Emissions from a Spark-Ignited Engine. **Environ. Sci. Technol.**, Vol. 25, No.12, p. 2005-2011, 1991.
- KAISER, E. W. ; SIEGL, W. O. ; RUSS, S. G. Fuel Composition Effects on Hydrocarbon Emissions from a Spark-Ignited Engine - Is Fuel Absorption in Oil Significant? **SAE Paper 952542**, p. 1-10, 1995a.
- KAISER, E. et al. Effects of Engine Operating Parameters on Hydrocarbon Oxidation in the Exhaust Port and Runner of a Spark-Ignited Engine. **SAE Paper 950159**, p. 9-19, 1995b.
- KALGHATGI, G. T. Effects of Combustion Chamber Deposits, Compression Ratio and Combustion Chamber Design on Power and Emissions in Spark-Ignition Engines. **SAE Paper 972886**, p. 13-25, 1997.
- KLIMSTRA, J. Interchangeability of Gaseous Fuels - The importance of the Wobbe Index. **SAE Paper 861578**, 1986.

- KRIEGER, R.B. ; BORMAN, G.L. The Computation of Apparent Heat Release for Internal Combustion Engines. **ASME Paper** n. 66-WA/DGP-4, p.1-16, 1966.
- KUBESH, J. ; KING, R. ; LISS, E. Effect of Gas Composition on Octane Number of Natural Gas Fuels. **SAE Paper** 922359, 1992.
- LANCASTER, D.R. et al. Effects of Turbulence on Spark-Ignition Engine Combustion. **SAE Trans.**, 85: 689-710, Paper 760160, 1976.
- LAUNDER, B. E. ; SPALDING, D. B. **The Numerical Computation of Turbulent Flow.** *Comp. Methods Appl. Mech. Eng.*, v.3, 269 p., 1974. Apud PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow.** McGraw-Hill, 197 p., 1980.
- LAVOIE, G. A. et al. Hydrocarbon Emissions Modeling for Spark Ignition Engines. In: MATTAVI, J.N. ; AMANN, C.A., ed. **Combustion Modeling in Reciprocating Engines.** New York, Plenum Press, p.409-441, 1980a.
- LAVOIE, G. A. ; BLUMBERG, P. N. A Fundamental Model for Predicting Fuel Consumption, NO_x and HC Emissions of the Conventional Spark-Ignited Engine. **Combustion Science and Technology**, v. 21, p. 225-258, 1980b.
- LEE, G. R. ; MORLEY, C. Chemical Modeling of Hydrocarbon Exhaust Emissions. **SAE Paper** 941958 p. 1-19, 1994.
- LEIKER, M. ; CHRISTOPH, K. ; RANKL, M. ; CARTELLIERI, M. W. Evaluation of the Antiknocking Property of Gaseous Fuels by Means of Methane Number and its Practical Application to Gas Engines. **ASME Paper** 72-DGP-4, 1972.
- LINNA , J. R. et al. Contribution of Oil Layer Mechanism to the Hydrocarbon Emissions from Spark-Ignition Engines. **SAE Paper** 972892 p. 93-113, 1997.
- LISS, W. E. ; THRASHER, W. H. Natural Gas as a Stationary Engine and Vehicular Fuel. **SAE Paper** 912364, 1991.
- MANSOURI, S.H.; HEYWOOD, J.B.; RADHAKRISHNAN, K. Divided-Chamber Diesel Engine, Part 1: A cycle-simulation Which Predicts Performance and Emissions. **SAE Paper** 820273, 1982

- MATTAVI, J.N. et al. Engine Improvements through Combustion Modeling. In: MATTAVI, J.N. ; AMANN, C.A., ed. **Combustion Modeling in Reciprocating Engines**. New York, Plenum Press, p.537-579, 1980.
- MENDIS, K. J. S. ; STONE, C. R. ; LADOMMATOS, N. ; WELLER, G. Modeling and Measurements from a Natural Gas Fuelled Engine. **SAE Paper 930927**, p. 143-161, 1993.
- MIN, K. ; CHENG, W. K. ; HEYWOOD, J. B. The Effects of Crevices on the Engine-Out Hydrocarbon Emissions in SI Engines. **SAE Paper 940306**, p. 89-103, 1994.
- MIN, K. ; CHENG, W. K. In Cylinder Oxidation of Piston Crevice Hydrocarbon in S. I. Engines. The Third International Symposium on **Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines**, p. 125-130, Japan, 1994.
- NAMAZIAN, M.; HEYWOOD, J. B. Flow in the Piston-Cylinder-Ring Crevices of a Spark-Ignition Engine: Effects on Hydrocarbon Emissions, Efficiency and Power. **SAE Paper 820088**, p. 1-26, 1982.
- NAMAZIAN, M. ; HANSEN, S. et al. Schlieren Visualization of the Flow and Density Fields in the Cylinder of a Spark-Ignition Engine. **SAE Paper 800044**, 1980.
- NIGRO, F. E. B. et al. Effects of natural gas composition on bus engine performance. **SAE Paper 973038**, p. 1-9, 1997.
- NORRIS, M. G. ; BAUER, W. ; HOCHGREB, S. Oxidation of Hydrocarbon from Lubricant Oil Layers in Spark-Ignition Engines. **26th Int. Symp. on Combustion**, p. 2645-2652, 1996.
- PANESAR, A. ; BROWN, P. G. ; WOODS, W. A. The Results of Recent Experiments on Unburnt Hydrocarbons. **IMEchE C45/88**, p. 261-271, 1988.
- PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. McGraw-Hill, 197 p., 1980.
- PERRY, J. H. ; CHILTON, C. H. ; KIRKPATRICK, S. D. **Chemical Engineers' Handbook**. McGraw-Hill, 4^a ed., 1963.

- PETRIS, C. ; GIGLIO, V. ; POLICE, G. A Mathematical Model of the Evaporation of the Oil Film Deposited on the Cylinder Surface of IC Engines. **SAE Paper 972920**, p. 1-9, 1997.
- POULOS, S. G. ; HEYWOOD, J. B. The Effect of Chamber Geometry on Spark-Ignition Engine Combustion. **SAE Paper 830334**, p. 1-24, 1983.
- POULSEN, J. H.; WALLACE, J. S. Operating Parameter Effects on the Speciated Hydrocarbon Emissions from a Natural Gas Fueled Engine. **SAE Paper 942007**, p. 151-168, 1994.
- RUSS, S. G. et al. Compression Ratio and Coolant Temperature Effects on HC Emissions from a Spark-Ignition Engine. **SAE Paper 950163**, p. 63-75, 1995.
- RYAN, T. W. ; CALLAHAN, T. J. Effects of Gas Composition on Engine Performance and Emissions. **Southwest Research Institute - Topical Report GETA 91-13**, Texas, USA., 91 p., 1991.
- SCHAEDEL, S. et al. Natural Gas Composition. **Rev. Natural Gas Fuels**, Jan. 1997.
- SCHAUB, F. S. et al. A procedure for calculating fuel gas blend knock rating for large-bore gas engines and predicting engine operation. **ASME - Journal of Engineering for Gas Turbine and Power**, v. 107, 1985.
- SCHRAMM, J.; SORENSON, S. C. Effects of Lubricating Oil on Hydrocarbon Emissions in an SI Engine. **SAE Paper 890622**, p. 1-16, 1989.
- SCHRAMM, J.; SORENSON, S. C. A Model for Hydrocarbon Emissions from SI Engines. **SAE Paper 902169**, p. 163-181, 1990.
- SHARP, C. A. ; ULLMAN, T. L. ; STAMPER, K. R. Transient Emissions from Two Natural Gas-Fueled Heavy-Duty Engines. **SAE Paper 932819**, p. 31-41, 1993.
- SHAYLER, P.J.; MAY, S. A.; MA, T. Heat transfer to the Combustion Chamber Walls in Spark Ignition Engines. **SAE Paper 950686**, p. 1-9, 1995.
- SHIH, L. K. ; ASSANIS, D. N. Effect of Ring Dynamics and Crevice Flows on Unburned Hydrocarbon Emissions. **J. Eng. Gas Turbines Power**, v. 116 (4), p. 784-792, 1994.

- SILVA, L. L. C. ; ZULAUF, M. R. Variability of Natural Gas Composition in Brazil. **SAE Paper 972977**, p. 1-11, 1997.
- SODRÉ, J. R. ; YATES, D. A. An Improved Model for Spark Ignition Engine Exhaust Hydrocarbons. **SAE Paper 971011**, p.135-152.
- SODRÉ, J. R. Further Improvements on a HC Emissions Model : Partial Burn Effects. 1999-01-0222, p.1-6, 1999.
- STACHE, I. ; ALKIDAS, A. C. The Influence of Mixture Preparation on the HC Concentration Histories from a S. I. Engine Running Under Steady-State Conditions. **SAE Paper 972981**, p. 101-119, 1997.
- STANGLMAIER, R. H. et al. Condensation of Fuel on Combustion Chamber Surfaces as a Mechanism for Increased HC Emissions from SI Engines During Cold Start. **SAE Paper 972884**, p. 1-12, 1997.
- TABACZYNSKI, R. J.; HEYWOOD, J. B. ; KECK, J. C. Time-Resolved Measurements of Hydrocarbon Mass Flowrate in the Exhaust of a Spark-Ignition Engine. **SAE Paper 720112**, p.1-13, 1972.
- TABACZYNSKI, R. J.; FERGUSON, C.R.; RADHAKRISHNAN, K. A Turbulent Entrainment Model for Spark-Ignition Engines Combustion. **SAE Paper 770647**, 1977.
- TAMURA, T.; HOCHGREB, S. Chemical Kinetic Modeling of the Oxidation of Unburned Hydrocarbons. **SAE Paper 922235**, p. 1-7, 1992.
- TINAUT, F. V. ; MELGAR, A. ; HORRILLO, A. J. Utilization of a Quasi-Dimensional Model for Predicting Pollutant Emissions in S. I. Engines. **SAE Paper 1999-01-0223**, p. 1-13, 1999.
- VILIENSKII, T. V. ; HEZMALIAN, D. M. **Dynamics of the Combustion of Pulverized Fuel**, Energia, Moscow, 246 p. , 1978. Apud SANTOS, M. L. S. Modeling and Simulation of Fluidized-Bed Boilers and Gasifiers for Carbonaceous Solids. Ph.D. Thesis. Department of Chemical Engineering, University of Sheffield, 1987.

- WAY, R. J. B. M. Methods for Determination of Composition and Thermodynamic Properties of Combustion Products for Internal Combustion Engine Calculations. **Proc. Inst. Mech. Eng.**, v. 190, p. 687-697, 1977.
- WESTBROOK, C. K. ; DRYER, F. L. Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion. **Prog. Energy Combust. Sci.**, Vol. 10, p. 1-57, 1984.
- WOSCHNI, G. Beitrag zum Problem des Wärmeüberganges im Verbrennungsmotor. **MTZ Motortechnische Zeitschrift**, 26 (4): 128-133, Apr. 1965.
- WOSCHNI, G. A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine. **SAE Paper 670931**, p.1-13, 1967.
- WOSCHNI, G. ; FIEGER, J. Experimentelle Bestimmung des örtlich gemittelten Wärmeübergangskoeffizienten in Ottomotor. **MTZ Motortechnische Zeitschrift**, 42 (6): 229-234, Jun.1981.
- WU, K. C. ; HOCHGREB, S. ; NORRIS, M. G. Chemical Kinetic Modeling of Exhaust Hydrocarbon Oxidation. **Combustion and Flame**, Vol. 100, p. 193-201, 1995.
- WU, K. C. ; HOCHGREB, S. Numerical Simulation of Post-Flame Oxidation of Hydrocarbons in Spark Ignition Engines. **SAE Paper 970886**, 1997.
- YOSHIDA, A. ; IGARASHI, T. ; KOTANI, Y. Extinction of Turbulent Diffusion Flames by Kolmogorov Microscale Turbulence. **Combustion and Flame**, Vol. 109, p. 669-681, 1997.
- ZABEU, C. B. e FIGUEIREDO, S. A. Combustion Data Acquisition System for Engines. **SAE Paper 973037**, p. 1-5, 1997.
- ZABEU, C. B. **Análise da Combustão em Motores baseada na Medição de Pressão**. São Paulo, 1999. 185p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo.

APÊNDICE A

Resultados de Ensaio Dinamométricos

- **Folhas de ensaio**
- **Curvas de pressão medida**

ENSAIO DE EMISSÕES	GÁS A			GÁS B
	condição de operação			
	2800 rpm	2800 rpm	1680 rpm	2800 rpm
parâmetros	100% carga	50% carga	100% carga	100% carga
Pressão barométrica úmida (kPa)	93.35	93.35	93.35	93.45
Pressão barométrica seca (kPa) NBR5484	91.53	91.56	91.54	92.17
Condição NBR 10813 (entre 0,96 e 1,06)	1.08	1.08	1.08	1.08
Potência observada (kW)	88.20	44.27	65.85	27.16
Vazão mássica de combustível (kg/h)	18.91	11.53	15.11	9.08
Vazão mássica de ar úmido(kg/h)	406.82	248.28	321.99	169.34
(F/A)seco	0.047	0.047	0.048	0.054
razão ar-combustível relativa	1.28	1.28	1.29	1.07
Fator de redução Ciclo Otto (entre 0,93 a 1,07)	1.10	1.10	1.10	1.10
r	1.00	1.00	1.00	1.00
q(mg/l)	37.61	22.92	30.04	18.15
qc(mg/l)	37.61	22.92	30.04	18.15
fm	0.30	0.30	0.30	0.30
Fator de redução Ciclo Diesel (entre 0,9 e 1,1)	1.02	1.02	1.02	1.02
Potência reduzida (kW)	96.72	48.62	72.33	29.77
Concentração de CO baixo (ppm) corrigida	433.07	566.76	489.62	664.55
Concentração de CO alto (%) corrigida	0.05	0.06	0.06	0.07
Concentração de CO2 (%) corrigida	9.26	9.16	9.28	11.29
Concentração de O2 (%) corrigida	5.36	5.36	5.29	3.12
Concentração de NO (ppm) corrigida	2350.98	1589.45	1954.98	3246.63
Concentração de CH4 (ppm) corrigida	681.52	828.21	671.57	122.27
Concentração de CH1,85 (ppm de C3H8) corrigida	229.84	282.27	222.35	111.49
Fluxo de massa de gás de escapamento (kg/h)-base úmida	425.73	259.81	337.10	178.43
Umidade específica do ar de admissão (g H2O/Kg ar seco)	12.41	12.14	12.29	8.63
Fator de conversão F1	0.86	0.86	0.86	0.84
Fator de conversão F2 para Diesel	1.13	1.10	1.11	1.00
Fator de conversão F2 para GNV	1.16	1.15	1.15	1.00
Concentração de CO baixo (ppm) em base úmida	371.93	486.84	419.83	556.69
Concentração de CO alto (%) em base úmida	0.04	0.05	0.05	0.06
Concentração de CO2 (%) em base úmida	7.95	7.87	7.96	9.46
Concentração de O2 (%) em base úmida	4.60	4.60	4.53	2.61
Concentração de NOx (ppm) em base úmida	2341.67	1568.53	1936.10	2720.84
Concentração de CH4 (ppm) em base úmida	585.31	711.44	575.86	102.43
Concentração de CH1,85 (ppm de CH4) base úmida	689.51	846.82	667.04	334.47
Vazão mássica de CO baixo (g/h)	152.96	122.19	136.72	95.95
Vazão mássica de CO alto (g/h)	175.28	136.61	155.75	107.98
Vazão mássica de CO total (g/h)	152.96	122.19	136.72	95.95
Vazão mássica de CO2 (g/h)	51408.36	31058.37	40747.35	25635.43
Vazão mássica de O2 (g/h)	21651.93	13209.38	16892.00	5153.14
Vazão mássica de NOx (g/h)	1582.09	646.74	1035.78	770.44
Vazão mássica de CH1,85 (g/h)	189.04	141.69	144.81	38.43
Vazão mássica de CH4 (g/h)	137.55	102.03	107.16	10.09
Balanco de carbono no escapamento (kg/h)	14.23	8.63	11.28	7.06
Balanco de carbono no combustível (kg/h)	14.21	8.67	11.36	6.83
Balanco de oxigênio no escapamento (kg/h)	95.38	57.70	75.43	41.37
Balanco de oxigênio na admissão (kg/h)	95.50	58.28	75.58	39.75

Concentração de CO baixo (ppm) corrigida - faixa1	51.86	64.66	57.43	72.42
Concentração de CO baixo (ppm) corrigida - faixa2	146.08	185.58	163.09	211.86
Concentração de CO baixo (ppm) corrigida - faixa3	433.07	566.76	489.62	664.55
Concentração de CO baixo (ppm) corrigida - faixa4	1026.37	1409.30	1183.85	1705.85
Concentração de CO baixo (ppm) corrigida	433.07	566.76	489.62	664.55
Concentração de CO alto (%) corrigida - faixa1	0.05	0.06	0.06	0.07
Concentração de CO alto (%) corrigida - faixa2	0.17	0.22	0.19	0.26
Concentração de CO alto (%) corrigida - faixa3	0.34	0.44	0.38	0.52
Concentração de CO alto (%) corrigida - faixa4	0.54	0.71	0.61	0.86
Concentração de CO alto (%) corrigida	0.05	0.06	0.06	0.07
Concentração de CO2 (%) corrigida - faixa1	0.63	0.63	0.63	0.71
Concentração de CO2 (%) corrigida - faixa2	1.81	1.80	1.82	2.08
Concentração de CO2 (%) corrigida - faixa3	4.54	4.50	4.55	5.26
Concentração de CO2 (%) corrigida - faixa4	9.26	9.16	9.28	11.29
Concentração de CO2 (%) corrigida	9.26	9.16	9.28	11.29
Concentração de O2 (%) corrigida - faixa1	1.97	0.41	1.95	1.15
Concentração de O2 (%) corrigida - faixa2	5.36	1.10	5.29	3.12
Concentração de O2 (%) corrigida - faixa3	26.74	5.36	26.37	15.26
Concentração de O2 (%) corrigida	5.36	5.36	5.29	3.12
Concentração de NO (ppm) corrigida - faixa1	19.26	13.02	16.01	25.92
Concentração de NO (ppm) corrigida - faixa2	98.38	66.50	81.80	135.58
Concentração de NO (ppm) corrigida - faixa3	467.22	315.56	388.35	654.12
Concentração de NO (ppm) corrigida - faixa4	2350.98	1589.45	1954.98	3246.63
Concentração de NO (ppm) corrigida	2350.98	1589.45	1954.98	3246.63
Concentração de CH4 (ppm) corrigida - faixa3	68.55	83.29	67.55	122.27
Concentração de CH4 (ppm) corrigida - faixa4	138.20	167.80	136.19	243.68
Concentração de CH4 (ppm) corrigida - faixa5	681.52	828.21	671.57	1220.01
Concentração de CH4 (ppm) corrigida - faixa6	1343.75	1632.80	1324.15	2402.30
Concentração de CH4 (ppm) corrigida	681.52	828.21	671.57	122.27
Concentração de C3H8 (ppm) corrigida - faixa3	46.05	56.55	44.55	22.45
Concentração de C3H8 (ppm) corrigida - faixa4	229.84	282.27	222.35	111.49
Concentração de C3H8 (ppm) corrigida - faixa6	1149.69	1411.65	1112.27	559.70
Concentração de C3H8 (ppm) corrigida - faixa7	4593.38	5640.93	4443.73	2232.03
Concentração de C3H8 (ppm) corrigida	229.84	282.27	222.35	111.49

Curvas de pressão medida no cilindro

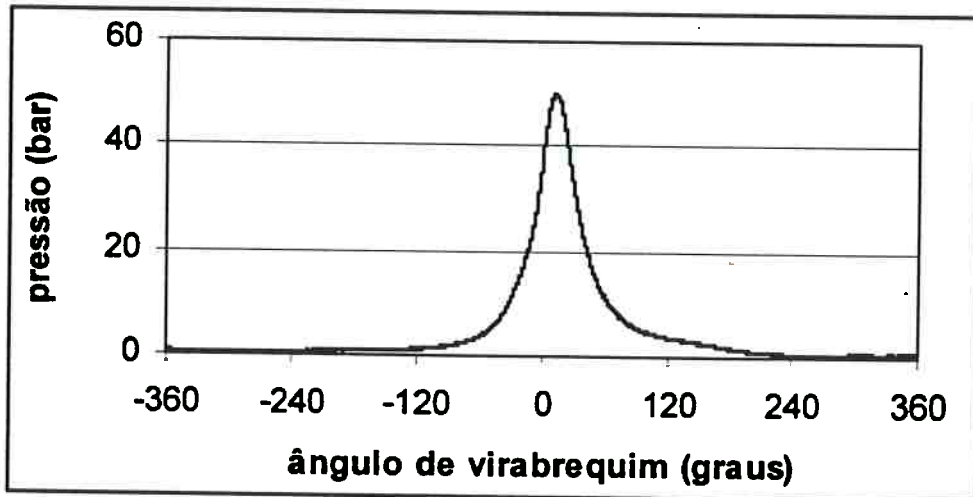


Fig. A.1 - Gás A - condição de operação : 2800 rpm a 100% de carga.

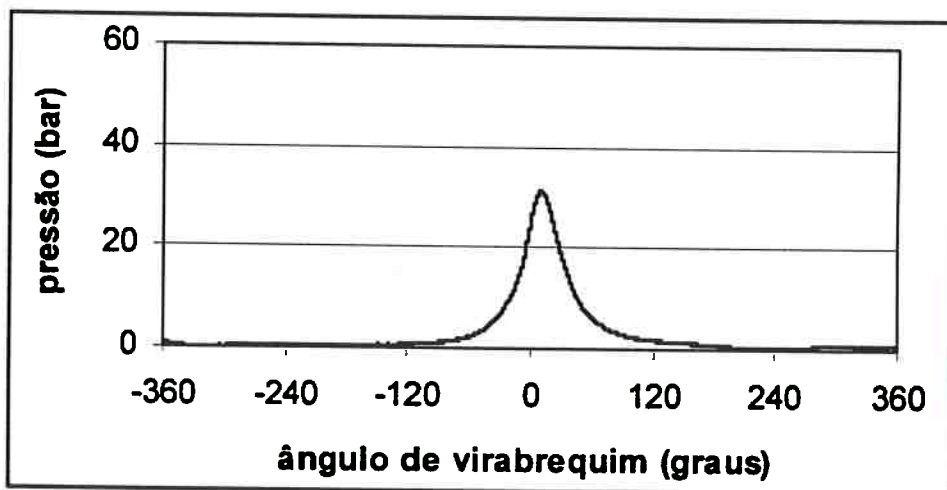


Fig. A.2 - Gás A - condição de operação : 2800 rpm a 50% de carga.

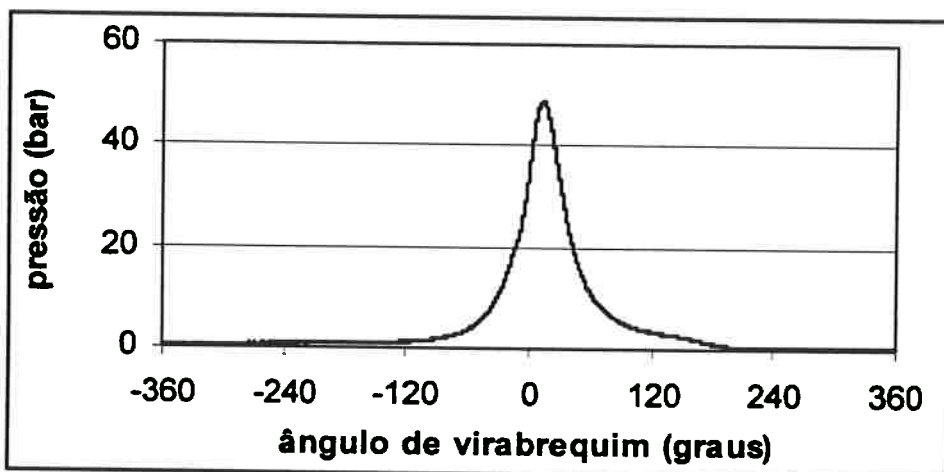


Fig. A.3 - Gás A - condição de operação : 1680 rpm a 100% de carga.

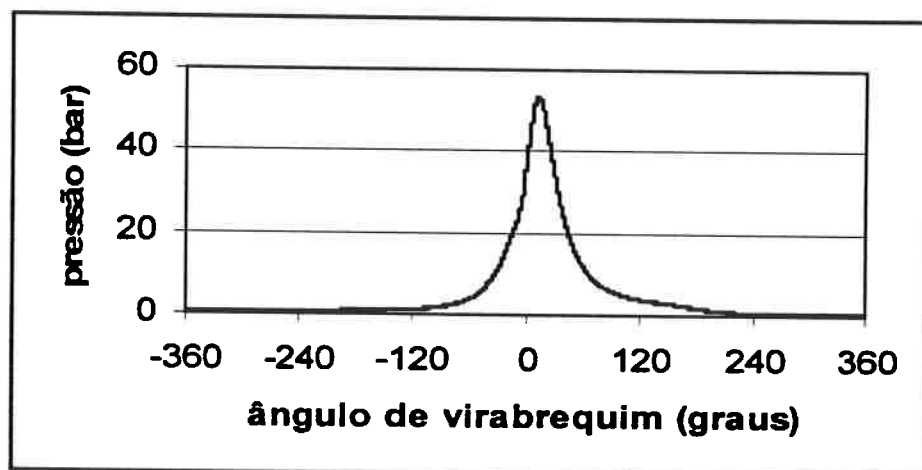


Fig. A.4 - Gás B - condição de operação : 2800 rpm a 100% de carga.

APÊNDICE B

Listagem dos Programas Computacionais

- **B1. Programa de cálculo da camada limite e massa de ajuste**

- **B2. Programa da formação de hidrocarbonetos -
cálculo da massa de HC não queimada no cilindro**

- **B3. Programa dos cálculos complementares**

```

double precision DEN,DELT,DELX,VALUE, A(25), B(25), AS(25),AN(25)
DIMENSION U(181,601,25),UFIX(181,601,25),YE(181,601),
&    YH(181,601),AM(181,601),S(181),SDOT(181), YFIX(181,601),
&    VMEDIA(181),RO(181), NI(601),ANIU(181),FT(181),NUM(181),V(25),
&    AMASSA(181),DEMASS(181), P(181), DP(181),YZERO(601)
NAMELIST/INPUT/ STROKE, CMRTIO, CONRAT, ALFZER, ALFEND,
& OMEGA, CRVOL, CLRNCE, MT, NX, NY, LASTEP, VSCTY,
& ROZERO, BORE, NPOINT, ISTEP,WFT,WFX
C-----
C
C    STANDARD DATA SET -- OVERRIDE BY USING NAMELIST INPUT
C
C-----
    call filayer

    STROKE = 0.133
    BORE = 0.0975
    CMRTIO = 12.
    CONRAT = 3.46
    ALFZER = 14.
    ALFEND = 180.
    OMEGA = 293.2
    CRVOL = .92E-06
    CLRNCE = 7.E-05
    MT = 166
    NX = 580
    NY = 12
    NPOINT = 580
    ISTEP = 1
    LASTEP = 20
    VSCTY = 2.5E-05
    ROZERO = 38.9
    WFX = 1.
    WFT = 0.5

C-----
C-----
C    read NAMELIST INPUT

    read (8, NML=INPUT)

    DO 10 I = 1,MT+1
    READ (4,1080) P(I),DP(I),TE,TU
10 CONTINUE

C
C    FIND DATA DERIVED FROM PISTON POSITION
C
    PI = 3.14159266
    ALFZER = ALFZER*PI/180.
    ALFEND = ALFEND*PI/180.
    DELX = STROKE/2.*(1.+ CONRAT-COS(ALFEND)-SQRT(CONRAT**2-
&    (SIN(ALFEND))**2)+2./(CMRTIO-1.))/NX
    DELT = (ALFEND-ALFZER)/OMEGA/MT
    DELETA = 1./FLOAT(NY)
    VPMEAN = STROKE*OMEGA/PI

```

```

DELZ =STROKE*CMRTIO/(CMRTIO-1.)/FLOAT(NPOINT)
AUX = 6*CRVOL/(PI*BORE*CLRNC)

DO 100 I = 1,MT+1
S(I) = STROKE/2.*(1.-COS(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)+CONRAT-
&      SQRT(CONRAT**2-(SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER))**2)+
&      2./(CMRTIO-1.))
SDOT(I) = STROKE/2.*OMEGA*SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)*(1.+
&      COS(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)/SQRT(CONRAT**2-
&      (SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER))**2))
NUM(I) = INT(S(I)/DELX)+1
FT(I) = DP(I)/P(I)
RO(I) = ROZERO*P(I)/P(1)
ANIU(I) = VSCTY/RO(I)/CLRNC**2
100 CONTINUE
SDOT(MT+1)=0.001

```

```

C
C      INITIALIZE VELOCITY AND BOUNDARY LAYER THICKNESS
C

```

```

DO 200 I = 1,MT+1
DO 200 J = 1,NX+1
YE(I,J) = 1.0
DO 200 K = 1,NY+1
U(I,J,K) = 0.
200 CONTINUE

```

```

C
C
C      INPUT VELOCITY AT CREVICE EXIT
C

```

```

DO 300 K = 1,NY+1
300 U(1,1,K) = ((3.*SDOT(1)+AUX/P(1)*DP(1))*FLOAT(K-1)*FLOAT(K-1)
&      - (4.*SDOT(1)+AUX/P(1)*DP(1))*FLOAT(K-1)*FLOAT(NY))/
&      FLOAT(NY*NY)+SDOT(1)

```

```

C*****
C
C      START OF INTEGRATION
C

```

```

C*****
C

```

```

DO 800 I = 2,MT+1
DO 400 K = 1,NY+1
400 U(I,1,K) = ((3.*SDOT(I)+AUX/P(I)*DP(I))*FLOAT(K-1)*FLOAT(K-1)
&      - (4.*SDOT(I)+AUX/P(I)*DP(I))*FLOAT(K-1)*FLOAT(NY))/
&      FLOAT(NY*NY)+SDOT(I)

```

```

DO 720 J = 2,NX+1
YE(I,J) = YE(I,J-1)
DO 450 K = 1,NY+1
450 V(K) = 0.
U(I,J,1) = SDOT(I)
DO 720 NSTEP = 1,LASTEP

```

```

C
C      CALCULATE THE COEFFICIENTS
C

```

```

DO 500 K = 2, NY
AB = V(K)/DELETA-(YE(I,J)-YE(I-1,J))/DELT*(K-1)

```



```

AN(K) = ANIU(I)/DELETA**2/YE(I,J)+0.5*(AB+ABS(AB))
AS(K) = ANIU(I)/DELETA**2/YE(I,J)+0.5*(-AB+ABS(-AB))
500 CONTINUE
C
C      SOLVE U EQUATION USING T.D.M.A.
C
A(1) = 0.
B(1) = SDOT(I)
DO 550 L = 2,NY
DEN = YE(I,J)*(1./DELT+U(I,J,L)/DELX)+AN(L)+AS(L)*(1.D00-A(L-1))
A(L) = AN(L)/DEN
550 B(L) = (YE(I,J)*(U(I-1,J,L)/DELT+U(I,J-1,L)*U(I,J,L)/DELX)+AS(L)
&        *B(L-1))/DEN
C
C      FREE BOUNDARY CONDITION
C
VALUE = FLOAT(J-1)/FLOAT(NUM(I))*SDOT(I)
U(I,J,NY+1) = VALUE
C
C      BACK SUBSTITUTION
C
DO 600 L = 1,NY
VALUE = VALUE*A(NY+1-L)+B(NY+1-L)
600 U(I,J,NY+1-L) = VALUE
C
C
C      SOLVE YE EQUATION
C
AB = (U(I-1,J-1,1)+U(I-1,J-1,NY+1))/2.
AC = (U(I-1,J,1)+U(I-1,J,NY+1))/2.
AD = (U(I,J-1,1)+U(I,J-1,NY+1))/2.
AE = (U(I,J,1)+U(I,J,NY+1))/2.
DO 700 K = 2,NY
AB = AB+U(I-1,J-1,K)
AC = AC+U(I-1,J,K)
AD = AD+U(I,J-1,K)
700 AE = AE+U(I,J,K)
YE(I,J) = (YE(I,J-1)*(-(1.-WFX)*WFT*FT(I)*DELX*DELT+
&        AD*DELETA*WFT*DELT-(1.-WFX)*DELX)+
&        YE(I-1,J)*(-(1.-WFT)*WFX*FT(I-1)*DELX*DELT-
&        AC*DELETA*(1.-WFT)*DELT+WFX*DELX)+
&        YE(I-1,J-1)*(-(1.-WFX)*(1.-WFT)*FT(I-1)*DELX*DELT+
&        AB*DELETA*(1.-WFT)*DELT+(1.-WFX)*DELX)/
&        (WFX*WFT*FT(I)*DELX*DELT+AE*DELETA*WFT*DELT+WFX*DELX)
C
C      FIND TRANSVERSAL VELOCITY
C
V(1) = 0.
DO 720 K = 2,NY+1
AB = 0.
AC = 0.
DO 710 L = 1,K-1
AB = AB+U(I,J,L)+U(I,J,L+1)-U(I,J-1,L)-U(I,J-1,L+1)
710 AC = AC+U(I,J,L)+U(I,J,L+1)
720 V(K) = -YE(I,J)*DELETA*(FT(I)*(K-1)+AB/(2.*DELX))- (YE(I,J)
&        -YE(I,J-1))*DELETA*AC/(2.*DELX)

```

```

C
C
C      END OF CALCULATION LOOP
C
800  CONTINUE
C
C      WRITE THE ORIGINAL RESULTS
C
      DO 805 I = 1,MT+1,5
      WRITE(10,1000) DELT*(I-1), S(I), SDOT(I), NUM(I), CLRNCE*ANIU(I)
      DO 805 J = 1,NUM(I),5
      WRITE(10,1010) DELX*(J-1),YE(I,J)*CLRNCE*1000.
      DO 805 K = 1,NY+1
      WRITE(10,1020) DELETA*(K-1), U(I,J,K)
805  CONTINUE

C
C      CONVERT RESULTS TO CYLINDER COORDINATES
C
      DO 900 I = 1,MT+1
      NJI = INT(S(I)/DELZ)

      DO 900 J = 1, NJI
      JREF = INT((S(I)-J*DELZ)/DELX)+1
      RATIO = (S(I)-J*DELZ)/DELX-(JREF-1.)
      YFIX(I,J) = (YE(I,JREF)*(1.-RATIO)+
&      YE(I,JREF+1)*RATIO)*CLRNCE*1000.

      DO 900 K =1,NY+1
900  UFIX(1+(I-1)/ISTEP,J1,K) = (U(I,JREF,K)*(1.-RATIO)+
&      U(I,JREF+1,K)*RATIO)/VPMEAN

      DO 901 J = INT(S(1)/DELZ)+1,INT(S(MT+1)/DELZ)
      DO 901 I = 1,MT+1
      IF ((S(I)-J*DELZ).GE. 0.) GO TO 901
      NI(J) = I+1
901  CONTINUE

      DO 902 J = INT(S(1)/DELZ)+1,INT(S(MT+1)/DELZ)
      YH(NI(J),J) = CRVOL/(PI*BORE*SDOT(NI(J)))*(-DP(NI(J))/P(NI(J)))
&*1000.
      DO 902 I = NI(J)+1,MT+1
      YH(I,J) = YH(NI(J),J)*RO(NI(J))/RO(I)
902  CONTINUE

      DO 903 J = INT(S(1)/DELZ)+1,INT(S(MT+1)/DELZ)
      YZERO(J) = YFIX(NI(J),J)-YH(NI(J),J)
      DO 903 I = NI(J),MT
      AM(I,J) = RO(I)*(YFIX(I,J)-YH(I,J)-YZERO(J))/1000.
903  CONTINUE

C
C      WRITE RESULTS ON CYLINDER COORDINATES
C

      DO 906 J = INT(S(1)/DELZ)+1,INT(S(MT+1)/DELZ),20
      WRITE (11,1035) J, (YFIX(I,J),I=NI(INT(S(1)/DELZ)+1),MT+1,2)
906  CONTINUE

      DO 908 J = INT(S(1)/DELZ)+1,INT(S(MT+1)/DELZ),20
      WRITE (11,1035) J, (YH(I,J),I=NI(INT(S(1)/DELZ)+1),MT+1,2)

```


double precision DEN, DELT, DELETA, VALUE, XO2FAR, A(601), B(601),
& RELAX, STRÉX, AS(601), AN(601), BP(601), BF(601), AOLD(601)
DIMENSION XCH4(360,601), XO2(360,601), T(360,601), Y(360,601),
& FLMASS(360), P(360), DPDT(360), TURBNI(360), TFAR(360),
& UNBRND(360), BURND(360)

NAMELIST/INPUT/ R, CP, O2MOL, CH4MOL, REACTA, REACTB, REACTH, CH4DIF,
&O2DIF, TDIF, JREF, TWALL, XCH4W, XO2W, XO2FAR, YINIT, IREF, MT, LASTEP, NETHA
&, RELAX, DELT, YZERO, A0, A1, A2, A3, A4, A5, A6, ALFZER, OMEGA, PMIN, CRVOL

#####

C
C
C
C-----

STANDARD DATA SET -- OVERRIDE BY USING NAMELIST INPUT

call filoxi

R = 0.00286
CP = 0.012
O2MOL = 32.
CH4MOL = 16.
REACTA = 3.552E14
REACTB = 15700.
REACTH = 500.
CH4DIF = 5.679E-09
O2DIF = 5.458E-09
TDIF = 5.13E-09
JREF = 10
TWALL = 470.
XCH4W = 0.034
XO2W = 0.225
XO2FAR = 2.2D-02
PMIN = 1.
CRVOL = .92E-06
YINIT = 7.7E-05
IREF = 50
MT = 165
LASTEP = 5
NETHA = 100
RELAX = 0.5D00
DELT = 5.96D-05
YZERO = 0.
A0 = 0.
A1 = 0.
A2 = 0.
A3 = 0.
A4 = 0.
A5 = 0.
A6 = 0.
ALFZER = 14.
OMEGA = 293.2

C-----

C-----

C READ NAMELIST INPUT

read (8, NML=INPUT)

```

DO 100 I = 1, IREF-1
READ (3,1000) P(1),DPDT(1),TFAR(1),TURBNI(1),TU
100 CONTINUE

```

```

DO 150 I = 1,MT-IREF+1
READ (3,1000) P(I),DPDT(I),TFAR(I),TURBNI(I),TU
150 CONTINUE

```

C

```

YINIT = YINIT+YZERO
PI = 3.14159266
DELETA = 2.D00/DBLE(NETHA)
STREX =1.D00-RELAX
DO 200 I =1,MT-IREF+1
X = FLOAT(I+IREF-2)+ALFZER*PI/(180.*OMEGA*DELT)
200 FLMASS(I) =((((((A6*X+A5)*X+A4)*X+A3)*X+A2)*X+A1)*X+A0)/DELT
TIN = FLOAT(IREF-1)+ALFZER*PI/(180.*OMEGA*DELT)
TFIN = FLOAT(MT)+ALFZER*PI/(180.*OMEGA*DELT)
AMASS = XCH4W*((((((A6/7.*TFIN+A5/6.)*TFIN+A4/5.)*TFIN+A3/4.)*
&TFIN+A2/3.)*TFIN+A1/2.)*TFIN+A0)*TFIN-((((((A6/7.*TIN+A5/6.)*TIN+
&A4/5.)*TIN+A3/4.)*TIN+A2/3.)*TIN+A1/2.)*TIN+A0)*TIN)

```

C

INITIALIZE CONCENTRATIONS AND TEMPERATURE

C

```

TOTMAS= YINIT*P(1)/(R*TWALL*DELETA*JREF)
JFIN = NINT(YINIT*P(1)/(R*TWALL*TOTMAS*DELETA))+1
DO 250 J = 1,JFIN
XCH4(1,J) = XCH4W
XO2(1,J) = XO2W
T(1,J) = TWALL
250 CONTINUE
UNBRND(1) = (JFIN-1)*DELETA*TOTMAS*XCH4W

```

```

DO 300 J = JFIN+1,NETHA+1
XCH4(1,J) = 0.
XO2(1,J) = XO2FAR
300 T(1,J) = TFAR(1)

```

```

Y(1,1) = 0.
AA = TOTMAS*R*DELETA/(2.*P(1))
DO 320 J = 2,NETHA+1
320 Y(1,J) = Y(1,J-1)+AA*(T(1,J)+T(1,J-1))

```

C*****

C

C

START OF INTEGRATION

C

C*****

C

```

DO 800 I = 2, MT-IREF+1
DO 350 J = 1,NETHA
XCH4(I,J) = XCH4(I-1,J)
XO2(I,J) = XO2(I-1,J)
Y(I,J) = Y(I-1,J)
350 T(I,J) = T(I-1,J)
XCH4(I,NETHA+1) = 0.
XO2(I,NETHA+1) = XO2FAR
T(I,NETHA+1) = TFAR(I)
DO 750 NSTEP = 1, LASTEP

```

C

C CALCULATE THE COEFFICIENTS OF XCH4 EQUATION
C

```
DO 400 J = 2, NETHA
AOLD(J) = R/(2.*DELTA)*(T(I,J)/P(I)+T(I-1,J)/P(I-1))
AV = AOLD(J)*DELTA/(2.*TOTMAS*DELETA)*(FLMASS(I)+FLMASS(I-1))
ADPLUS = (CH4DIF*SQRT(T(I,J))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J)/T(I,J)+
&CH4DIF*SQRT(T(I,J+1))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J+1)/T(I,J+1)+
&CH4DIF*SQRT(T(I-1,J))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J)/T(I-1,J)+
&CH4DIF*SQRT(T(I-1,J+1))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J+1)/T(I-1,J+1))/
&(4.*R*TOTMAS*TOTMAS*DELETA*DELETA)
ADMNUS = (CH4DIF*SQRT(T(I,J))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J)/T(I,J)+
&CH4DIF*SQRT(T(I,J-1))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J-1)/T(I,J-1)+
&CH4DIF*SQRT(T(I-1,J))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J)/T(I-1,J)+
&CH4DIF*SQRT(T(I-1,J-1))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J-1)/T(I-1,J-1))/
&(4.*R*TOTMAS*TOTMAS*DELETA*DELETA)
AN(J) = (ADPLUS+0.5*(-AV+ABS(AV)))
AS(J) = (ADMNUS+0.5*(AV+ABS(-AV)))
BP(J) = REACTA/(T(I-1,J)+T(I,J))*EXP(-2.*REACTB/(T(I-1,J)+
&T(I,J)))*(XO2(I-1,J)+XO2(I,J))/O2MOL
400 CONTINUE
```

C
C SOLVE XCH4 EQUATION USING T.D.M.A.
C

```
A(1) = 0.D00
B(1) = 0.D00
DO 450 K = 2, NETHA
L = NETHA+2-K
DEN = AOLD(L) + (AN(L)+BP(L)+AS(L)*(1.D00-A(K-1)))*RELAX
A(K) = AN(L)*RELAX/DEN
450 B(K) = (AOLD(L)*XCH4(I-1,L)+AS(L)*B(K-1)*RELAX+(AS(L)*(XCH4(I-1,L-1)
&-XCH4(I-1,L))+AN(L)*(XCH4(I-1,L+1)-XCH4(I-1,L))-BP(L)*XCH4(I-1,L))
&*STREX)/DEN
```

C
C BOUNDARY CONDITION FAR FROM THE WALL
C

```
VALUE = B(NETHA)/(1.D00-A(NETHA))
XCH4(I,1) = VALUE
```

C
C BACK SUBSTITUTION
C

```
DO 500 L = 1, NETHA
VALUE = VALUE*A(NETHA+1-L)+B(NETHA+1-L)
500 XCH4(I,L+1) = VALUE
```

C
C CALCULATE THE COEFFICIENTS OF XO2 EQUATION
C

```
DO 550 J = 2, NETHA
AOLD(J) = R/(2.*DELTA)*(T(I,J)/P(I)+T(I-1,J)/P(I-1))
AV = AOLD(J)*DELTA/(2.*TOTMAS*DELETA)*(FLMASS(I)+FLMASS(I-1))
ADPLUS = (O2DIF*SQRT(T(I,J))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J)/T(I,J)+
&O2DIF*SQRT(T(I,J+1))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J+1)/T(I,J+1)+
&O2DIF*SQRT(T(I-1,J))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J)/T(I-1,J)+
&O2DIF*SQRT(T(I-1,J+1))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J+1)/T(I-1,J+1))/
&(4.*R*TOTMAS*TOTMAS*DELETA*DELETA)
ADMNUS = (O2DIF*SQRT(T(I,J))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J)/T(I,J)+
&O2DIF*SQRT(T(I,J-1))+P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J-1)/T(I,J-1)+
&O2DIF*SQRT(T(I-1,J))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J)/T(I-1,J)+
&O2DIF*SQRT(T(I-1,J-1))+P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J-1)/T(I-1,J-1))/
&(4.*R*TOTMAS*TOTMAS*DELETA*DELETA)
```

```

AN(J) = (ADPLUS+0.5*(-AV+ABS(AV)))
AS(J) = (ADMNUS+0.5*(AV+ABS(-AV)))
BP(J) = REACTA/(T(I-1,J)+T(I,J))*EXP(-2.*REACTB/(T(I-1,J)+
&T(I,J)))*(XCH4(I-1,J)+XCH4(I,J))*2./CH4MOL
550 CONTINUE
C
C      SOLVE O2 EQUATION USING T.D.M.A.
C
A(1) = 0.D00
B(1) = DBLE(XO2FAR)
DO 580 K = 2,NETHA
L=NETHA+2-K
DEN = AOLD(L)+(AN(L)+BP(L)+AS(L)*(1.D00-A(K-1)))*RELAX
A(K) = AN(L)*RELAX/DEN
580 B(K)=(AOLD(L)*XO2(I-1,L)+AS(L)*B(K-1)*RELAX+(AS(L)*(XO2(I-1,L-1)
&-XO2(I-1,L))+AN(L)*(XO2(I-1,L+1)-XO2(I-1,L))-BP(L)*XO2(I-1,L)
&*STREX)/DEN
C
C      BOUNDARY CONDITION FAR FROM THE WALL
C
VALUE = B(NETHA)/(1.D00-A(NETHA))
XO2(I,1) = VALUE
C
C      BACK SUBSTITUTION
C
DO 600 L = 1,NETHA
VALUE = VALUE*A(NETHA+1-L)+B(NETHA+1-L)
600 XO2(I,L+1) = VALUE
C
C      CALCULATE THE COEFFICIENTS OF T EQUATION
C
DO 650 J = 2,NETHA

AOLD(J) = R*CP/(2.*DELTA)*(T(I,J)/P(I)+T(I-1,J)/P(I-1))
AV = AOLD(J)*DELTA/(2.*TOTMAS*DELETA)*(FILMASS(I)+FILMASS(I-1))
ADPLUS = (TDIF*P(I)/T(I,J)**0.3+CP/R*P(I)*P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J)/
&(T(I,J)*T(I,J))+
&TDIF*P(I)/T(I,J+1)**0.3+CP/R*P(I)*P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J+1)/
&(T(I,J+1)*T(I,J+1))+
&TDIF*P(I-1)/T(I-1,J)**0.3+CP/R*P(I-1)*P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J)
&/T(I-1,J)*T(I-1,J))+
&TDIF*P(I-1)/T(I-1,J+1)**0.3+CP/R*P(I-1)*P(I-1)*TURBNI(I-1)*
&Y(I-1,J+1)/(T(I-1,J+1)*T(I-1,J+1)))/
&(4.*R*CP*TOTMAS*TOTMAS*DELETA*DELETA)*AOLD(J)*DELTA
ADMNUS = (TDIF*P(I)/T(I,J)**0.3+CP/R*P(I)*P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J)/
&(T(I,J)*T(I,J))+
&TDIF*P(I)/T(I,J-1)**0.3+CP/R*P(I)*P(I)*TURBNI(I)*Y(I,J-1)/
&(T(I,J-1)*T(I,J-1))+
&TDIF*P(I-1)/T(I-1,J)**0.3+CP/R*P(I-1)*P(I-1)*TURBNI(I-1)*Y(I-1,J)
&/T(I-1,J)*T(I-1,J))+
&TDIF*P(I-1)/T(I-1,J-1)**0.3+CP/R*P(I-1)*P(I-1)*TURBNI(I-1)*
&Y(I-1,J-1)/(T(I-1,J-1)*T(I-1,J-1)))/
&(4.*R*CP*TOTMAS*TOTMAS*DELETA*DELETA)*AOLD(J)*DELTA
AN(J) = (ADPLUS+0.5*(-AV+ABS(AV)))
AS(J) = (ADMNUS+0.5*(AV+ABS(-AV)))
BF(J) = -REACTA*REACTH/(T(I-1,J)+T(I,J))*EXP(-2.*REACTB/(T(I-1,J)+
&T(I,J)))*(XO2(I-1,J)+XO2(I,J))*(XCH4(I-1,J)+XCH4(I,J))/2./O2MOL
BP(J) = -R*R*(T(I-1,J)*DPDT(I-1)/(P(I-1)*P(I-1))+T(I,J)*
&DPDT(I)/(P(I)*P(I)))/2.

```

```

650 CONTINUE
C
C SOLVE T EQUATION USING T.D.M.A.
C
A(1) = 0.
B(1) = TWALL
DO 680 L = 2, NETHA
DEN = AOLD(L) + (AN(L) + BP(L) + AS(L) * (1.000 - A(L-1))) * RELAX
A(L) = AN(L) * RELAX / DEN
680 B(L) = (AOLD(L) * T(I-1, L) - BF(L) + AS(L) * B(L-1) * RELAX + (AS(L) *
&(T(I-1, L-1) - T(I-1, L)) + AN(L) * (T(I-1, L+1) - T(I-1, L)) - BP(L) * T(I-1, L))
&*STREX) / DEN
C
C BOUNDARY CONDITION FAR FROM THE WALL
C
VALUE = TFAR(I)
T(I, NETHA+1) = VALUE
C
C BACK SUBSTITUTION
C
DO 700 L = 1, NETHA
VALUE = VALUE * A(NETHA+1-L) + B(NETHA+1-L)
700 T(I, NETHA+1-L) = VALUE
C
C RECOVER Y COORDINATE
C
Y(I, 1) = 0.
AA = TOTMAS * R * DELETA / (2. * P(I))
DO 720 J = 2, NETHA+1
720 Y(I, J) = Y(I, J-1) + AA * (T(I, J) + T(I, J-1))
750 CONTINUE
C
C CALCULATE BURNED AND UNBURNED CH4 MASS
C
BURND(I) = 0.
UNBRND(I) = (XCH4(I, 1) + XCH4(I, NETHA+1)) / 2.
DO 770 J = 2, NETHA
BURND(I) = BURND(I) + (XO2(I-1, J) + XO2(I, J)) * (XCH4(I-1, J) + XCH4(I, J))
&*EXP(-2. * REACTB / (T(I-1, J) + T(I, J))) / (T(I-1, J) + T(I, J)) ** 2
770 UNBRND(I) = UNBRND(I) + XCH4(I, J)
BURND(I) = BURND(I) * REACTA * P(I) * TOTMAS * DELETA / (R * O2MOL) * DELT
UNBRND(I) = UNBRND(I) * TOTMAS * DELETA
C
C END OF CALCULATION LOOP
C
800 CONTINUE
BRNDM = 0.
DO 802 I = 2, MT - IREF + 1
802 BRND = BRND + BURND(I)
DELMAS = (P(140 - IREF + 1) - PMIN) * CRVOL / R / TWALL * XCH4W
C
C WRITE THE ORIGINAL RESULTS
C
WRITE(10, *) BRND, AMASS, DELMAS, BRND / (UNBRND(1) + AMASS),
&(1. - UNBRND(MT - IREF + 1) / (UNBRND(1) + AMASS))
DO 805 I = 1, MT - IREF + 1, 5
WRITE(10, *) (I + IREF - 1), UNBRND(I), BURND(I)
DO 805 J = 1, NETHA + 1, 5
WRITE(10, *) XCH4(I, J), XO2(I, J), T(I, J), Y(I, J)
805 CONTINUE

```


C
C
C
C
C
C

#####

FORMAT STATEMENTS

1000 FORMAT (5E14.7)

1010 FORMAT (1H,1X,'X = ',F7.4,5X,'YE = ',F7.4)

1020 FORMAT (1X,F6.3,5X,F8.4)

1030 FORMAT (I2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,
& F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2,F6.2)

1040 FORMAT (1H,1X,'CRANK ANGLE = ',F5.1)

1050 FORMAT (I2,F7.3,F7.3,F7.3,F7.3,F7.3,F7.3,F7.3,F7.3,F7.3,F7.3,
& F7.3,F7.3,F7.3)

STOP
END

C
C

```
        DIMENSION S(861),SDOT(861),DAMP(861),P(861),DPDT(861),T(861),
&          Y(861),TURBNI(861)
```

```
        NAMELIST/INPUT/ STROKE,BORE,CMRTIO,CONRAT,ALFZER, ALFOPN, ALFEND,
& OMEGA, PLTROP, MT, IREF, CREVOL, PZERO, PFIN, TZERO, SCALEN
```

```
*****
```

```
C
```

```
C
```

```
C
```

```
C-----
```

```
        call filepres
```

```
        STROKE = 0.133
```

```
        BORE = 0.0975
```

```
        CMRTIO = 12.
```

```
        CONRAT = 3.45
```

```
        ALFZER = 15.
```

```
        ALFOPN = 113.
```

```
        ALFEND = 180.
```

```
        OMEGA = 290.
```

```
        PLTROP = 1.36
```

```
        MT = 165
```

```
        IREF = 50
```

```
        CREVOL = 1.E-06
```

```
        PZERO = 50.
```

```
        PFIN = 1.86
```

```
        TZERO = 2250.
```

```
        SCALEN = 0.1
```

```
C-----
```

```
C-----
```

```
C
```

```
        read NAMELIST INPUT
```

```
        read (8, NML=INPUT)
```

```
C
```

```
C
```

```
C
```

```
        FIND DATA DERIVED FROM PISTON POSITION
```

```
        PI = 3.14159266
```

```
        NT = NINT(MT*(ALFOPN-ALFZER)/(ALFEND-ALFZER))
```

```
        ALFZER = ALFZER*PI/180.
```

```
        ALFOPN = ALFOPN*PI/180.
```

```
        ALFEND = ALFEND*PI/180.
```

```
        DELT = (ALFEND-ALFZER)/OMEGA/MT
```

```
        VPMEAN = STROKE*OMEGA/PI
```

```
        TURBEN = 1.5*(0.75*VPMEAN)*(0.75*VPMEAN)
```

```
        THAU0 = SCALEN/SQRT(TURBEN)
```

```
        TURBNI(1) = 0.09*SQRT(TURBEN)
```

```
        P(1) = PZERO
```

```
        T(1) = TZERO
```

```
        DPDT(1) = 0.
```

```
        S(1) = STROKE/2.*(1.-COS(ALFZER)+CONRAT-SQRT(CONRAT**2-
&(SIN(ALFZER))**2)+2./(CMRTIO-1.))
```

```

DO 100 I = 2, NT+1

S(I) = STROKE/2.*(1.-COS(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)+CONRAT-
&      SORT(CONRAT**2-(SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER))**2)+
&      2./(CMRTIO-1.))

SDOT(I) = STROKE/2.*OMEGA*SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)*(1.+
&      COS(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)/SQRT(CONRAT**2-
&      (SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER))**2))

DAMP(I) = 1.-EXP(-OMEGA*DELT*(I-1)*23./PI)

TURBNI(I) = 0.09*SQRT(TURBEN/(1.+0.9*(I-1)*DELT/THAU0)**1.1)

P(I) = (P(I-1)+DPDT(I-1)*DELT/2.)/(1.+PLTROP*DELT/2.*SDOT(I)*
&      DAMP(I)/S(I))

T(I) = T(1)/(P(1)*S(1))*P(I)*S(I)

DPDT(I) = 2.*(P(I)-P(I-1))/DELT-DPDT(I-1)

100 Y(I) = -CREVOL*DPDT(I)/(PI*BORE*SDOT(I)*P(I))

DPREF = (PFIN-P(NT+1))/(MT-NT)/DELT
D2P = DPDT(NT+1)-DPDT(NT)
NCORR = INT((DPREF-DPDT(NT+1))/D2P)+NT+1

DO 130 I = NT+2,NCORR
DPDT(I) = DPDT(I-1)+D2P
P(I) = P(I-1)+(DPDT(I)+DPDT(I-1))*DELT/2.
SDOT(I) = STROKE/2.*OMEGA*SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)*(1.+
&      COS(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)/SQRT(CONRAT**2-
&      (SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER))**2))
Y(I) = -CREVOL*DPDT(I)/(PI*BORE*SDOT(I)*P(I))
TURBNI(I) = 0.09*SQRT(TURBEN/(1.+0.9*(I-1)*DELT/THAU0)**1.1)
130 T(I) = T(NT+1)*(P(I)/P(NT+1))**((PLTROP-1.)/PLTROP)

DO 150 I = NCORR+1, MT+1
DPDT(I) = DPREF
P(I) = P(I-1)+DPREF*DELT
SDOT(I) = STROKE/2.*OMEGA*SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)*(1.+
&      COS(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER)/SQRT(CONRAT**2-
&      (SIN(OMEGA*DELT*(I-1)+ALFZER))**2))
Y(I) = -CREVOL*DPDT(I)/(PI*BORE*SDOT(I)*P(I))
TURBNI(I) = 0.09*SQRT(TURBEN/(1.+0.9*(I-1)*DELT/THAU0)**1.1)
150 T(I) = T(NT+1)*(P(I)/P(NT+1))**((PLTROP-1.)/PLTROP)

DO 200 I = 1, MT+1
WRITE(10,900) P(I), DPDT(I), T(I), TURBNI(I), Y(I)
200 CONTINUE

WRITE(10,*) DELT, Y(IREF), P(IREF), T(IREF)

900 FORMAT(5E14.7)

STOP
END

```

C