

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO PARANÁ

DINARTE SANTOS

**MODELO TERMODINÂMICO
PARA A SIMULAÇÃO
DO CICLO DE MOTORES
DE IGNIÇÃO POR CENTELHA**

**CURITIBA
DEZEMBRO - 2009**

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO PARANÁ

DINARTE SANTOS

**MODELO TERMODINÂMICO
PARA A SIMULAÇÃO
DO CICLO DE MOTORES
DE IGNIÇÃO POR CENTELHA**

Dissertação apresentada como requisito à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Mecânica, Curso de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, Departamento de Ciências Exatas e de Tecnologia, Pontifícia Universidade Católica do Paraná

Orientador: Prof. Dr. Jose Antonio Andrés Velásquez Alegre

Co-Orientador: Prof. Dr.-Ing. Irionson Antonio Bassani

**CURITIBA
DEZEMBRO - 2009**

Dissertação de Mestrado
Autor: Dinarte Santos

Aprovada por:

Prof. Dr. Jose Antonio Andrés Velásquez Alegre (Orientador)

Prof. Dr. Waldyr Luiz Ribeiro Gallo

Dr. Waldir Pedro Martignoni

Prof. Dr.-Ing. Irionson Antonio Bassani (Co-Orientador)

Curitiba, dezembro de 2009

AGRADECIMENTOS

Agradeço a

Deus, por me permitir atingir a idade em que muitos estão só contando os dias para a aposentadoria, com saúde e disposição para enfrentar um trabalho desta envergadura;

Meus pais, por me educarem, apoiarem, e incentivarem, ao longo de minha existência;

Meus familiares e amigos, por compreenderem minha ausência nas horas de lazer dedicadas por mim a este trabalho;

Meu co-orientador Irionson Bassani, por me incentivar a iniciar este trabalho, e a concluí-lo;

Meu orientador Antonio Andrés Velásquez Alegre, pela atenção dedicada a mim e a este trabalho;

Os professores do Curso de Mestrado, pelos ensinamentos e atenção;

PETROBRAS, por patrocinar o custo das mensalidades e deslocamentos necessários para a conclusão deste trabalho, e especialmente ao meu ex-gerente setorial Hedemir Flores Gomes, por permitir que dedicasse parte de meu tempo a ele.

“A careful study of any of the marvels of scientific achievement we have would reveal the slow and often fortuitous discoveries of countless workers, many now forgotten, whose discoveries led the foundation of our era. The underlying reason for the fallacy that massive expenditure will necessarily lead to a scientific objective lies in not recognizing that no one genius nor even any collection of geniuses and able workers is omniscient. It is impossible to plan any program which could guarantee that the basic facts or knowledge vital to a project can be found at once. All too often it is the independent worker carrying on a study in a seemingly off-track area who succeeds in uncovering the missing information. What group effort and expenditure of vast sums can do – often under such an urgent stress as produced by war – is to marshal the combined resources by rapidly exploiting existing basic knowledge for a difficult technological feat.”

“There is no time in much of today’s instruction for giving the experimental background upon which theory is based. In consequence, the recently trained young physicist is losing his basic physical intuition. It is only a rare teacher today who has time to tell his students how the great discoveries of the past and their symbolic interpretations came to be made...”

“This prompts one to wonder whether, despite the great technical advances and the proliferation of knowledge, the physicists will not soon lose the art of discovery or at least will become less proficient in this field of endeavor.”

Leonard B. Loeb, 1961

RESUMO

Este trabalho descreve o desenvolvimento e a implementação de um modelo de duas zonas de combustão que permite simular os processos que compõem o ciclo de trabalho dos motores de ignição por centelha, incluindo os processos de compressão, combustão-expansão, exaustão e admissão.

O modelo considera a velocidade finita da combustão, a transferência de calor entre o fluido de trabalho e as paredes do cilindro e o escoamento através das válvulas de admissão e exaustão. Para representar a liberação de energia durante a combustão, utilizou-se a correlação de Wiebe.

Os resultados obtidos com o modelo computacional são comparados com dados experimentais da pressão interna ao cilindro de um motor CFR monocilíndrico, cuja taxa de compressão é variável. A comparação permite validar o modelo computacional e o tratamento de dados experimentais adotados neste trabalho.

Palavras-chave: Motores de ignição por centelha; Modelo termodinâmico; Simulação do ciclo

ABSTRACT

This M. Sc. thesis describes the development of a two-zone combustion model, which allows simulating the working cycle processes of a spark ignition engine, including the compression process, the combustion-expansion process, as well as the exhaust and intake processes.

The computational model takes into account the finite duration of the combustion process, the heat transfer between the working fluid and the cylinder walls, and the mass flows through the intake and exhaust valves. In order to represent the combustion heat release, the correlation proposed by Wiebe is used.

Results obtained by using the developed computational model are compared with experimental in-cylinder pressure data, measured on a single-cylinder, variable compression-ratio CFR engine. Validation of both the computational model and the data treatment procedure adopted in this work is made possible by this comparison.

Keywords: Spark ignition engines; Thermodynamic model; Cycle simulation

SUMÁRIO

RESUMO
ABSTRACT
AGRADECIMENTOS
SUMÁRIO
LISTA DE FIGURAS
LISTA DE TABELAS
LISTA DE SÍMBOLOS

Capítulos

1. Introdução	1
1.1. Introdução.....	1
1.2. Motivação.....	1
1.3. Objetivos.....	2
1.4. Metodologia e considerações para a elaboração do modelo termodinâmico.....	3
1.5. Resultados esperados.....	5
2. Histórico e Desenvolvimento do Modelo	6
2.1. Histórico.....	6
2.2. Descrição do ciclo Otto.....	10
2.2.1. Descrição das fases do motor.....	14
2.2.2. Descrição das variáveis termodinâmicas.....	17
2.3. Desenvolvimento das equações diferenciais.....	20
2.3.1. Hipóteses assumidas.....	20
2.3.2. Modelo dos processos de escapamento, admissão e compressão.....	29
2.3.3. Modelo de duas zonas de combustão.....	34
2.4. Descrição dos modelos de simulação.....	40
2.4.1. Modelo preditivo.....	40
2.4.2. Modelo de diagnose.....	43
2.5. Descrição das rotinas.....	45
2.5.1. Determinação das frações molares do ar atmosférico.....	48
2.5.2. Determinação das frações molares da mistura de ar, combustível e gases residuais.....	48
2.5.3. Determinação de parâmetros geométricos.....	50
2.5.4. Determinação da abertura das válvulas.....	50
2.5.5. Determinação dos coeficientes de descarga das válvulas.....	53
2.5.6. Determinação das propriedades termodinâmicas.....	55
3. Experimentos e Simulações	57
3.1. Descrição das simulações.....	57
3.1.1 Motor acionado externamente.....	58
3.1.2 Motor queimando.....	59
3.2. Descrição dos Experimentos.....	62
3.2.1. Sistema de aquisição de dados.....	63

3.2.2. Sistema de Controle	64
3.2.3. Tratamento de dados experimentais de pressão	65
3.2.4. Considerações sobre o motor CFR	66
3.3. Experimentos preliminares	68
3.3.1. Volume relativo do cilindro em função da posição do virabrequim.....	68
3.3.2. Aquisição dos dados de pressão experimental com o motor CFR acionado externamente	68
3.3.3. Calibração do indicador de taxa de compressão do motor CFR.....	69
3.3.4. Determinação dos coeficientes de descarga das válvulas.....	72
4. Resultados	75
4.1. Acionamento externo do motor	75
4.2. Funcionamento normal do motor	81
4.3. Validação dos modelos termodinâmicos	88
4.4. Validação do modelo do ciclo Otto completo	93
5. Conclusões e sugestões de continuidade	100
5.1. Conclusões	100
5.2. Sugestões de continuidade	101
Referências Bibliográficas	103
Anexos	
A. Modelo de escapamento, admissão e compressão	106
B. Modelo de duas zonas de combustão.....	115
C. Determinação das propriedades termodinâmicas e das frações molares	124
D. Propriedades geométricas e cinemáticas	142
E. Modelo completo do ciclo Otto.....	145

Lista de Figuras

Figura 1 (a):	O primeiro motor Otto e seu diagrama p V.....	12
Figura 1 (b):	Motor Otto, único exemplar em funcionamento na América Latina.....	12
Figura 2:	Vista em perspectiva das partes móveis do motor.....	13
Figura 3:	Os quatro tempos do ciclo Otto. (Heywood, 1989).....	14
Figura 4:	Diagrama p V do ciclo Otto real (Stiesch, 2006).....	16
Figura 5:	Diagrama p V/V _c , traçado a partir de dados experimentais do motor CFR operando com combustível isoctano em condições estequiométricas.....	17
Figura 6:	Volume do cilindro (linha sólida) e massa de gases no seu interior durante as fases de escapamento, admissão e compressão do motor CFR, determinado pela integração do modelo termodinâmico de escapamento, admissão e compressão do motor CFR.....	19
Figura 7:	Volumes ocupados pelas zonas queimada e não queimada, durante a combustão.....	22
Figura 8:	Volumes de controle durante as fases do ciclo Otto.....	23
Figura 9:	Perfis de combustão de Wiebe para vários parâmetros de forma (Stiesch, 2006).....	24
Figura 10:	Pressão, volume e fração de massa queimada; em função da posição angular do virabrequim e das fases do ciclo Otto. (Heywood, 1989).....	24
Figura 11:	Volumes e superfícies de controle no cilindro.....	29
Figura 12:	Fluxograma da rotina de cálculo do escoamento através da válvula de admissão.....	32
Figura 13:	Fluxograma da rotina de cálculo do escoamento através da válvula de escapamento.....	33
Figura 14:	Sistema termodinâmico aberto (Stiesch, 2006).....	36
Figura 15:	Sistema termodinâmico fechado (Stiesch, 2006).....	36
Figura 16:	Volumes de controle durante o processo de combustão.....	37
Figura 17:	Fluxograma da rotina do modelo preditivo.....	41
Figura 18:	Fluxograma da rotina do modelo de diagnose.....	43
Figura 19:	Fluxograma da seqüência de acesso às rotinas pelo modelo preditivo.....	45
Figura 20:	Fluxograma da seqüência de acesso às rotinas pelo modelo de diagnose.....	47
Figura 21:	Diagrama polar de abertura das válvulas.....	50
Figura 22:	Perfil de abertura da válvula de admissão.....	53
Figura 23:	Perfil de abertura da válvula de escapamento.....	53
Figura 24:	Ajuste dos dados experimentais do coeficiente de descarga das válvulas de admissão e de escapamento.....	54
Figura 25:	Fluxograma utilizado para a validação dos modelos termodinâmicos.....	58
Figura 26:	Fluxograma descritivo do modelo de simulação utilizado para a identificação dos ciclos.....	61
Figura 27:	Esquema da montagem experimental.....	62
Figura 28:	Vista do sensor de pressão, (Wlodarczyk, 1999).....	63
Figura 29:	Sinais nas entradas do osciloscópio.....	64
Figura 30:	Resposta de um filtro passa-altas a um pulso retangular (Rao, 2006).....	65
Figura 31:	O motor CFR (Waukesha, Dresser Industries, 1980).....	67
Figura 32:	Corte transversal do motor CFR mostrando a câmara de combustão, as válvulas e os dutos de admissão e escapamento (Waukesha, Dresser Industries, 1980).....	67

Figura 33:	Curvas de pressão e de volume relativo V/V_c em função do tempo, para taxas de compressão aparentes iguais a 8 e 10, obtidas com o motor acionado externamente	69
Figura 34:	Diferença entre as pressões experimental máxima e mínima do ciclo em função da taxa de compressão aparente, obtidas com o motor CFR acionado externamente.....	70
Figura 35:	Resultados da simulação da pressão p , do volume relativo V/V_c e da temperatura T para o motor acionado externamente com a taxa de compressão $r_c = 6,01$	70
Figura 36:	Taxa de compressão do modelo termodinâmico r_c em função da diferença entre as pressões máxima e mínima ao longo do ciclo, obtida por simulação do motor acionado externamente.....	71
Figura 37:	Função de calibração da taxa de compressão do motor CFR.....	72
Figura 38:	Vista geral da bancada de fluxo <i>Superflow 110</i>	73
Figura 39:	Diagrama p V experimental do motor CFR acionado externamente (taxa aparente de compressão igual a 8)	76
Figura 40:	Diagrama p V experimental do motor CFR acionado externamente, com taxa aparente de compressão igual a 10	77
Figura 41:	Diagrama p V simulado do motor CFR acionado externamente (taxa aparente de compressão igual a 8, correspondente à taxa de 6,01 no modelo termodinâmico)	77
Figura 42:	Diagrama p V simulado do motor CFR acionado externamente (taxa aparente de compressão igual a 10, correspondente a 7.67 no modelo termodinâmico)	78
	Frequência.....	74
Figura 43:	Comparação entre a pressão experimental e a simulada sem compensação no interior do cilindro	78
Figura 44:	Comparação dos resultados da simulação com os resultados experimentais após tratamento do sinal.....	80
Figura 45:	Diagramas p V experimental e simulado.....	80
Figura 46:	Curvas de pressão experimental e de volume relativo em função do tempo	81
Figura 47:	Volume relativo do cilindro V/V_c e sua taxa de variação $d(V/V_c)/dt$	82
Figura 48:	Diagrama p V antes da filtragem de ruído e da compensação de frequência dos dados experimentais	82
Figura 49:	Diagrama p V após a filtragem de ruído com o método MLS.....	84
Figura 50:	Diagrama p V/V_c traçado a partir dos dados experimentais, antes e após a filtragem de ruído pelo método MLS	84
Figura 51:	Taxa de variação da curva de pressão experimental em função da posição angular do virabrequim calculada pelo método MLS	85
Figura 52:	Diagrama p V/V_c após a filtragem de ruído e a compensação de frequência....	86
Figura 53:	Curva de pressão experimental: Filtragem de ruídos e compensação da resposta do sensor de pressão	87
Figura 54:	Diagrama polar dos dados de pressão experimentais (preto) e compensados (cinza) em função da posição angular do comando de válvulas no motor CFR.....	87
Figura 55:	Evolução das temperaturas da zona não queimada T_u , da zona queimada T_b e da temperatura média T_m em função da posição do virabrequim durante o intervalo em que as válvulas estão fechadas.....	89

Figura 56:	Produto pressão x volume relativo $p V/V_c$ e temperatura média T_m dos gases no interior do cilindro em função da posição angular do virabrequim.....	90
Figura 57:	Evolução da função $\frac{p V}{V_c T_m}$ em função da posição do virabrequim enquanto as válvulas permanecem fechadas	91
Figura 58:	Comparação entre os valores simulados $p V/V_c$ sim e os dados experimentais $p V/V_c$ comp do produto $p V/V_c$, em função da posição do virabrequim	92
Figura 59:	Comparação entre as curvas $-\frac{p}{V} \frac{dV}{dt}$ e $\frac{dp}{dt}$, em função da posição angular do virabrequim	93
Figura 60:	Pressão dos gases no interior do cilindro do motor CFR simulada ao longo de quatro ciclos Otto completos sucessivos	94
Figura 61:	Comparação entre os resultados da simulação e os dados da pressão experimental no interior do cilindro do motor CFR ao longo de quatro ciclos Otto completos.....	95
Figura 62:	Diagrama $p V$ do motor CFR ao longo de quatro ciclos Otto completos sucessivos..	95
Figura 63:	Diagrama $p V$ do motor CFR ao longo do quarto ciclo Otto completo.....	96
Figura 64:	Comparação entre os diagramas $p V$ simulado e experimental do motor CFR ao longo de quatro ciclo Otto completos.	97
Figura 65:	Temperaturas dos gases de combustão e da mistura fresca no interior do cilindro do motor CFR, simuladas ao longo de quatro ciclos Otto completos sucessivos	99
Figura B.1:	Volumes de controle durante a combustão	115
Figura B.2:	Volume de controle da zona queimada durante a combustão	116
Figura B.3:	Volume de controle da zona não queimada durante a combustão	118
Figura D.1:	Geometria do mecanismo pistão-biela-manivela (Heywood, 1989)	142
Figura D.2:	Gráfico polar da razão entre o volume instantâneo $V(\theta)$ e o volume máximo V_{max} do cilindro e da razão entre a área instantânea $A(\theta)$ e a área máxima A_{max} das paredes do cilindro	144
Figura E.1:	pressão, número de mols de ar, temperatura da mistura fresca T_u , temperatura dos gases de combustão T_b , simulação do primeiro ciclo completo.....	153
Figura E.2:	pressão, número de mols de ar, temperatura da mistura fresca T_u , temperatura dos gases de combustão T_b , simulação do primeiro ciclo completo e da compressão do segundo ciclo.....	155
Figura E.3:	Diagrama $p V$ do primeiro ciclo completo.....	156
Figura E.4:	pressão, número de mols de ar, temperatura da mistura fresca T_u , temperatura dos gases de combustão T_b , simulação do primeiro e segundo ciclos completos e da compressão do terceiro ciclo.	163
Figura E.5:	Diagrama $p V$ do primeiro e do segundo ciclo completos.	164

Figura E.6:	pressão, número de mols de ar, temperatura da mistura fresca T_u , temperatura dos gases de combustão T_b , simulação do primeiro, segundo e terceiro ciclos completos.....	169
Figura E.7:	pressão, número de mols de ar, T_u , temperatura dos gases de combustão T_b , simulação do primeiro, segundo e terceiro ciclos completos e da compressão do quarto ciclo.....	172
Figura E.8:	Diagrama p V do primeiro, segundo e terceiro ciclos completos.....	173
Figura E.9:	pressão, número de mols de ar, temperatura da mistura fresca T_u , temperatura dos gases de combustão T_b , simulação do primeiro, segundo, terceiro e quarto ciclos completos.....	179
Figura E.10	Diagrama p V ao longo dos quatro primeiros ciclos.....	180
Figura E.11	Gráfico das temperaturas dos gases de combustão T_b , mistura fresca T_u , pressão p no interior do cilindro e fração de massa queimada f_b em função da posição angular do virabrequim, obtidas por simulação do ciclo completo do motor CFR.	181

Lista de Tabelas

Tabela 1:	Coeficientes da serie de Fourier que representa a abertura das válvulas	52
Tabela 2:	Diferença entre as pressões máxima e mínima no cilindro (em bars), em função da taxa de compressão do modelo termodinâmico (rc)	71
Tabela 3:	Vazão através das válvulas (valores experimentais)	73
Tabela 4:	Coeficientes de descarga da admissão e do escapamento.....	74
Tabela 5:	Propriedades termodinâmicas do ar nas condições de estagnação	74

Lista de Símbolos

A	área
Afl	área da frente livre de chama
ATDC	após o PMS
B	diâmetro do cilindro
BC	ponto morto inferior
Cd	coeficiente de descarga
CFR	comitê de pesquisa de combustível
cp	calor específico à pressão constante
cv	calor específico a volume constante
dG	diferencial da função de Gibbs
dm	diferencial de massa
dQ	diferencial de calor
DSO	osciloscópio digital registrador
dt	diferencial de tempo
dU	diferencial de energia interna
dW	diferencial de trabalho
ECU	unidade de controle eletrônica
EVC	posição angular de fechamento da válvula de escapamento
EVO	posição angular de abertura da válvula de escapamento
fb	fração de massa queimada
G	função de Gibbs
H	entalpia
h	entalpia específica
h_adm	abertura da válvula de admissão
h_exh	abertura da válvula de escapamento
hc	coeficiente de transferência de calor
IVC.	posição angular de fechamento da válvula de admissão
IVO	posição angular de abertura da válvula de admissão
k	coeficiente isentrópico
k	condutibilidade térmica
k	número de átomos de nitrogênio na formula empírica do combustível
l	número de átomos de oxigênio na formula empírica do combustível
LED	diodo emissor de luz
m	massa
m	número de átomos de hidrogênio na formula empírica do combustível
MLS	mínimos quadrados móveis
mw	massa molecular
n	número de átomos de carbono na formula empírica do combustível
n	número de mols
NTC	coeficiente de temperatura negativo
Nu	número de Nusselt
p	pressão
PC	computador pessoal
PMI	ponto morto inferior
PMS	ponto morto superior
R	constante universal dos gases

RC	constante de tempo, resistência x capacitância
rc	relação ou taxa de compressão
Re	número de Reynolds
s	entropia específica
Sp	velocidade média do pistão
St	velocidade de chama turbulenta
T	temperatura absoluta
t	tempo
TC	ponto morto superior
U	energia interna
u	energia interna específica
USB	barramento serial universal
V	volume
Vc	volume da câmara de combustão
Vd	volume deslocado pelo cilindro
w	velocidade característica
W	trabalho
x	fração molar
α	relação molar nitrogênio/oxigênio do ar atmosférico
β	relação molar gás carbônico/oxigênio do ar atmosférico
γ	relação molar água/oxigênio do ar atmosférico
δ	relação molar argônio/oxigênio do ar atmosférico
θ	posição angular
ρ	densidade
ω	velocidade angular, rad/s

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução

Os métodos de ensaio virtual não eliminam por completo a necessidade de desenvolvimento experimental, mas permitem explorar numerosas opções (mais abundantes do que em testes de *hardware*) em um estágio inicial do projeto dos motores, a um custo muito menor (Mendera, 2005; Stiesch, 2006).

Do ponto de vista do projetista, avaliar por simulação os efeitos de modificações na geometria do cilindro, do mecanismo biela-manivela ou do comando de válvulas sobre o desempenho do motor leva a resultados mais rápidos e menos dispendiosos do que construir e ensaiar um novo motor ou parte deste. A simulação torna possível comparar projetos diferentes antes da construção e do ensaio de protótipos.

Do ponto de vista do formulador de combustíveis, a simulação torna possível avaliar o desempenho de um combustível em condições diferentes daquelas para as quais se dispõe de dados experimentais obtidos por ensaio em motor. Tal avaliação é interessante em várias situações, por exemplo:

- Quando as rotações ou pressões de interesse excederem os limites de resistência mecânica do motor disponível para os ensaios;
- Quando a geometria do motor disponível para ensaios for diferente daquela em que se desejaria testar o combustível.

1.2 Motivação

As atividades de modelagem podem contribuir para a engenharia de motores em diversos níveis de generalidade ou detalhe, correspondentes a etapas diferentes de desenvolvimento de modelos, através do:

1. Desenvolvimento de uma compreensão mais completa do processo em estudo, a partir da formulação do modelo;

2. Identificação de variáveis importantes para orientar esforços de desenvolvimento experimental mais racionais e, portanto, menos dispendiosos;
3. Predição do comportamento dos motores em uma vasta faixa de projeto e variáveis de operação, para examinar conceitos antes de se dar início a grandes programas de hardware, determinar tendências e compromissos e, caso o modelo seja suficientemente preciso, para otimizar o projeto e o controle;
4. Estabelecimento de uma base racional para inovações de projeto.

Todas estas contribuições são valiosas. A passagem de um modelo para a próxima etapa depende da exatidão com que aquele representa o processo real, da extensão em que tiver sido testado e validado, e do tempo e esforço necessários para efetuar conjuntos extensivos de cálculos e interpretar seus resultados (Heywood, 1989).

Por outro lado, não existe um programa com rotinas abertas que permita avaliar os efeitos da variação contínua dos parâmetros do combustível sobre o funcionamento de um motor CFR por simulação numérica.

O desenvolvimento de um programa genérico com rotinas abertas paramétricas e modulares apresenta o atrativo de proporcionar uma alternativa flexível e econômica aos já existentes, além de um maior controle sobre as rotinas de simulação. A concepção modular do programa possibilita o acréscimo de mais rotinas e funções, para torná-lo mais versátil e extensível conforme as necessidades futuras.

1.3 Objetivos

Este trabalho de mestrado visa o desenvolvimento de um modelo termodinâmico que permita simular numericamente o ciclo de trabalho de um motor de ignição por centelha.

O objetivo geral é desenvolver um modelo que permita simular os processos que compõem o ciclo de trabalho dos motores ciclo Otto, incluindo os processos de compressão, combustão-expansão, escapamento e admissão.

São características desejáveis do modelo (Stiesch, 2006):

- ser formalmente correto, ou seja, livre de inconsistências;
- descrever a realidade de forma tão exata quanto possível;
- ser passível de resolução matemática;
- apresentar um custo ou o tempo de cálculo necessário à sua solução, justificável no contexto do ambiente de trabalho em que será utilizado. Para isto, deve ser tão simples quanto possível, e tão complexo quanto necessário.

O objetivo específico é elaborar um modelo termodinâmico paramétrico representado por um sistema de equações diferenciais, que considere:

- A composição de equilíbrio dos produtos de combustão;
- A taxa de transferência de calor às paredes do cilindro;
- A taxa de queima do combustível pela fórmula de Wiebe;
- As propriedades termodinâmicas dos fluidos de trabalho.

1.4 Metodologia e considerações para a elaboração do modelo termodinâmico

Baseado nos princípios de conservação de massa e energia e nas considerações feitas no objetivo específico será proposto um modelo termodinâmico representado por um sistema de equações diferenciais. Como procedimento experimental será desenvolvido um banco de ensaios utilizando um motor CFR de ignição por centelha, instrumentado de forma a permitir a coleta de dados experimentais. A validação do modelo será feita por comparação dos resultados das simulações com os dados experimentais.

A metodologia adotada para a modelagem do ciclo Otto baseia-se nas sugestões de Stiesch (2006), adaptadas à situação específica deste trabalho. Para a elaboração do modelo, serão seguidas as seguintes etapas:

1. Definição do sistema e de suas fronteiras, determinação dos reservatórios relevantes, e dos fluxos de massa e energia entre eles;
2. Confeção dos balanços, obtidos pela igualdade entre a variação de cada reservatório e a diferença entre sua entrada e saída;
3. Descrição dos fluxos de massa e energia, baseada em leis da Física;
4. Simplificação do modelo resultante, desprezando influências secundárias;
5. Integração do modelo, isto é, a integração numérica do conjunto de equações diferenciais que o descreve;
- 6.a. Determinação do diagrama p V por simulação do ciclo completo;
- 6.b. Validação do modelo, por comparação entre os dados calculados e os obtidos experimentalmente.

Para desenvolver um modelo termodinâmico paramétrico são necessárias algumas simplificações ou hipóteses que facilitem escrever e posteriormente resolver as equações diferenciais de que o modelo consiste. As principais considerações a serem feitas referem-se aos objetivos específicos, ou seja, à composição de equilíbrio dos produtos de combustão, à taxa de transferência de calor às paredes do cilindro, à taxa de queima do combustível pela fórmula de Wiebe e às propriedades termodinâmicas dos fluidos de trabalho.

Para simplificar a determinação da composição dos produtos da combustão, limita-se o número de espécies químicas neles presentes a doze, e resolve-se a fração molar de cada uma delas por considerações de equilíbrio termodinâmico pleno (Borman, 1975).

O cálculo da taxa de transferência de calor entre os gases e as paredes do cilindro será efetuado multiplicando-se a área instantânea do cilindro pela diferença instantânea de temperatura entre os gases e as paredes, e pelo coeficiente de convecção. A área instantânea das paredes do cilindro será determinada a partir de sua geometria e da cinemática do mecanismo biela-manivela. O modelo termodinâmico é simplificado considerando-se a hipótese de movimento circular uniforme do virabrequim do motor CFR. Isto possibilita substituir a integral $\theta(t) = \int \omega dt$ pelo produto $\theta(t) = \omega t$, o que evita uma dimensão a mais na matriz de equações diferenciais que representa o modelo termodinâmico proposto. Já o

coeficiente de convecção será determinado a partir da fórmula de Woschni, que é uma função empírica de parâmetros geométricos do cilindro e da velocidade média do pistão.

A taxa de queima de combustível será determinada pela fórmula de Wiebe, que é uma correlação empírica com três parâmetros ajustáveis (Heywood, 1989). O emprego da fórmula de Wiebe evita a necessidade de calcular a área e o volume da chama, simplificando as equações diferenciais que descrevem o modelo termodinâmico.

A entalpia, a energia interna e os calores específicos a pressão e volume constante de cada uma das espécies químicas componentes dos fluidos de trabalho serão determinadas pela equação de Shomate. Os polinômios de Shomate permitem determinar estas propriedades termodinâmicas em função da temperatura. (NIST Chemistry Webbook, site, acessado em 27 de julho de 2010).

Estas simplificações possibilitam propor um modelo termodinâmico que descreve a correlação entre o estado termodinâmico dos gases no interior do cilindro e a troca de calor entre os gases e as paredes do cilindro, a taxa de variação de volume do cilindro e a taxa mássica de combustão, utilizando-se para isto a dp/dt é a taxa de variação de pressão no interior do cilindro, a dT_u/dt é a taxa de variação da temperatura da mistura não queimada e a dT_b/dt é a taxa de variação da temperatura dos gases da combustão.

A principal hipótese deste trabalho consiste em propor um sistema de equações diferenciais que permita descrever o processo de combustão num motor de ignição por centelha.

Assim, é proposto um modelo termodinâmico que pode ser descrito por:

$$A \cdot \begin{bmatrix} dp/dt \\ dT_u/dt \\ dT_b/dt \end{bmatrix} = B \quad (\text{eq. 52.a})$$

onde

dp/dt é a taxa de variação de pressão no interior do cilindro;

dT_u/dt é a taxa de variação da temperatura da mistura não queimada;

dT_b/dt é a taxa de variação da temperatura dos gases da combustão;

A é uma matriz quadrada de ordem 3, cujos coeficientes dependem do estado termodinâmico dos gases no interior do cilindro (eq. 53);

B é uma matriz quadrada de ordem 3, cujos coeficientes dependem da troca de calor entre os gases e as paredes do cilindro, da taxa de variação de volume do cilindro e da taxa mássica de combustão (eq. 54).

A inversão da matriz A possibilita determinar as taxas de variação de pressão dp/dt e temperaturas dT_u/dt e dT_b/dt , da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} dp/dt \\ dT_u/dt \\ dT_b/dt \end{bmatrix} = A^{-1} \cdot B$$

A integração numérica das taxas de variação dp/dt , dT_u/dt , dT_b/dt permite o cálculo da pressão p e das temperaturas T_u , T_b , e a partir destes o traçado do diagrama p V do ciclo Otto completo. Para efetuar a integração numérica é necessário conhecer as condições iniciais de p, T_u , T_b .

1.5 Resultados esperados

Como resultado deste trabalho espera-se obter um modelo paramétrico para a descrição do ciclo Otto baseado em leis da Física e da Química, descrito por meio de um conjunto de equações diferenciais e que apresente o mínimo de parâmetros a serem determinados experimentalmente.

O modelo desenvolvido deve permitir o traçado de curvas de pressão a partir dos resultados simulados e reproduzir os clássicos diagramas p V , semelhante aqueles obtidos experimentalmente em um motor CFR funcionando conforme o ciclo Otto.

As curvas de pressão e os clássicos diagramas p V serão obtidos experimentalmente para o caso do motor CFR ser acionado externamente e funcionar com a queima de um combustível. Para tanto, será montado um banco de ensaio com o motor CFR. Este será equipado com um sistema de instrumentação, de controle e de aquisição de dados adequados que possibilitem a variação, o controle e a obtenção dos parâmetros envolvidos nas diversas fases do ciclo dos motores de ignição por centelha.

No intuito de possibilitar maior confiabilidade ao modelo proposto, os dados obtidos serão tratados matematicamente, visando à redução da influência de ruídos e a compensação do erro devido à resposta em frequência do sensor dinâmico de pressão utilizado. Também será necessário efetuar o cálculo do volume relativo do cilindro em função da posição do virabrequim, a aquisição dos dados de pressão experimental com o motor CFR acionado externamente, a calibração do indicador de taxa de compressão do motor CFR e a determinação dos coeficientes de descarga das válvulas.

O desempenho do modelo obtido será avaliado para as diversas fases do ciclo Otto a partir da comparação a ser efetuada entre as curvas e diagramas obtidos a partir dos resultados da simulação e dos dados experimentais.

Capítulo 2

Histórico e Desenvolvimento do Modelo

2.1 Histórico

A preocupação crescente com o meio ambiente e as exigências de baixo consumo de combustível e maior potência impulsionam o desenvolvimento dos motores automotivos.

Em 1912, quando a ignição por bateria e o motor de arranque recém tinham sido introduzidos pela Delco, as pessoas se deram conta da detonação, um distúrbio na combustão conhecido vulgarmente por “batida de pino”, e o público a reconheceu como uma barreira impedindo a construção de motores mais potentes e eficientes. Era então natural que os fabricantes de carros a motor e os usuários culpassem o novo tipo de ignição pelas batidas de pino. Esta circunstância levou a Delco a realizar um estudo da detonação; dando início a uma série de experimentos para estudar a relação entre os combustíveis, a ignição, e os motores. Logo nas primeiras fases do desenvolvimento desta pesquisa, percebeu-se que tanto o combustível como os motores estavam envolvidos, e faltava encontrar a parte que cabia a a cada um. Descobriu-se também que a potência e a eficiência de qualquer tipo de motor dependiam de quanto o combustível empregado era isento de detonação (Kettering, 1944).

Na década de 1920, o Comitê de Pesquisa de Combustíveis Cooperativo (*CFR, do inglês Cooperative Fuel Research*) foi formado para responder à necessidade dos refinadores de petróleo e fabricantes de motores norte-americanos desenvolverem um meio de medir e definir as características de combustão da gasolina. Em 1928, o Comitê decidira que um motor de testes monocilíndrico padronizado era necessário como primeiro passo para desenvolver um método de teste de detonação de gasolinas. No início de 1928, o Comitê CFR aceitou um projeto básico da *Waukesha Motor Company*, e desenhos de projeto detalhados foram feitos imediatamente.

Após a aprovação de seu projeto pelo Comitê do CFR no início de dezembro de 1928, o primeiro protótipo do motor CFR começou a ser construído. Desenhos detalhados foram feitos, gabaritos e moldes de fundição foram produzidos e usinados e a construção do motor foi concluída em menos de 45 dias, para ser apresentado na reunião anual da SAE em Detroit em 14 de janeiro de 1929. Havia outros motores de teste de detonação concorrentes, mas cada um deles tinha defeitos que impediam sua aceitação universal, de

modo que no início da década de 1930 a maioria destes saíram de uso em favor do novo motor CFR da Waukesha. O plano inicial era que a Waukesha construísse 75 destes motores para satisfazer às necessidades totais da indústria. Isto mudou antes mesmo da produção começar, e eles têm sido construídos desde então e usados mundialmente, atingindo a marca de 5000 unidades construídas no início da década de 1980.

O motor CFR foi o primeiro motor de testes padronizado universalmente aceito pelas indústrias de motores e combustíveis que pôde ser produzido em quantidade suficiente para atender às suas necessidades. A possibilidade de variar a taxa de compressão de forma rápida e precisa sem afetar as folgas das válvulas ou a configuração básica da câmara de compressão foi provavelmente o que fez este projeto superar seus rivais. Mover o cilindro completo para cima e para baixo em relação ao pistão era muito melhor que trocar calços, movimentar um bloco de metal dentro da câmara, ou trabalhar com compressão fixa como era feito nos motores de teste até então existentes. O projeto inicial sobreviveu a dois aperfeiçoamentos do cárter até hoje, sem qualquer alteração no formato da câmara de combustão, disposição do trem de acionamento das válvulas, ou da compressão variável, de forma que uma medida feita no motor mais antigo ainda concordará com a medida de octanagem num motor atual, após quase oitenta anos. Alguns dos primeiros motores ainda estão em uso e bem cuidados. Este motor melhorou a capacidade das indústrias automotiva e de petróleo adequarem seus produtos para trabalhar melhor em conjunto, porque forneceu um padrão reconhecido para definir a qualidade dos combustíveis. Certamente, ele levou à evolução rápida dos combustíveis e dos motores. Os motores CFR ainda são vendidos para uso em pesquisa básica de áreas novas, tais como emissões de escapamento e aplicabilidade de combustíveis alternativos.

O desejo de simular os motores antes de construí-los tem acompanhado os projetistas desde a época da construção dos primeiros motores. As primeiras tentativas de analisar o funcionamento dos motores aproximaram os processos que ocorrem de fato em seu interior como ciclos ideais de combustão a volume ou pressão constantes.

Os valores de propriedades termodinâmicas de misturas frescas e queimadas relevantes para cálculos de motores estão disponíveis em cartas, tabelas e equações algébricas, desenvolvidas para ajustar-se a dados dispostos em forma de tabela. As cartas são um método de apresentar as propriedades termodinâmicas de misturas de gás frescas e queimadas para cálculos de motores a combustão interna. As de Hottel et alii e as de Newhall e Starkman foram as mais utilizadas (Heywood, 1989). Atualmente as cartas foram substituídas pelos modelos computacionais para as propriedades termodinâmicas dos fluidos de trabalho, mas ainda são úteis para fins ilustrativos ou didáticos, e um método fácil e exato quando for necessário apenas um número limitado de cálculos.

As tabelas de propriedades termodinâmicas do ar são úteis para analisar a operação de motores acionados externamente, motores Diesel e compressores. As Tabelas de Gás de Keenan, Chao, e a de Kaye são a referência padrão para as propriedades termodinâmicas do ar em baixas pressões (muito abaixo da pressão crítica), em que a lei dos gases ideais é precisa (Heywood, 1989). Tabelas da composição e das propriedades termodinâmicas dos produtos de combustão também foram compiladas, e são úteis para determinar propriedades e dados de concentrações de espécies em misturas queimadas de gases para uma faixa de relações de equivalências, temperaturas, e pressões. O conjunto mais extenso de tabelas de composição de produtos de combustão e propriedades termodinâmicas é o de AGARD, "Properties of Air and Combustion Products with Kerosene and Hydrogen Fuels", de Banes et alii (Heywood, 1989).

Os modelos computacionais são utilizados quando a quantidade de cálculo for grande, ou precisão elevada for essencial. Equações que modelam a composição e as propriedades

termodinâmicas de misturas de gás frescas e queimadas foram desenvolvidas para utilização em computadores, com diversas faixas de aplicação e exatidão. A simulação de processos nos motores tornou-se muito mais sofisticada e exata após o desenvolvimento dos computadores digitais de alta velocidade, que permitiram modelar a composição e propriedades dos seus fluidos de trabalho, assim como os processos individuais de admissão, compressão, combustão, expansão, e escapamento que compõem o seu ciclo de operação. Os modelos mais completos baseiam-se em ajustes de curvas polinomiais aos dados termodinâmicos de cada espécie de gás presente nas misturas, e nas hipóteses de que a composição da mistura fresca é fixa e a mistura queimada está em equilíbrio termodinâmico.

A modelagem de processos de motores continua a desenvolver-se, à medida que nossa compreensão da física e química dos fenômenos de interesse gradualmente se expande e na proporção em que a capacidade dos computadores resolverem equações complexas continua a aumentar. Dois tipos básicos de modelos foram desenvolvidos para representar os processos que governam o desempenho e as emissões dos motores. Nos modelos termodinâmicos a estrutura predominante das equações é baseada na conservação de energia, enquanto nos modelos de dinâmica de fluidos predomina uma análise plena do movimento dos fluidos. Modelos de motor deste tipo foram desenvolvidos e utilizados extensivamente para prever características de operação de motores (potência indicada, pressão média efetiva, consumo específico de combustível, etc.) e definir o estado do gás para cálculos de emissões. Estes modelos seguem as variáveis de estado termodinâmicas e o estado químico do fluido de trabalho através da admissão, compressão, combustão, expansão, e processos de escapamento do motor; sendo freqüentemente chamados simulações de ciclo de motores.

Se forem conhecidas as transferências de massa na superfície de controle delimitada pelo cilindro durante a admissão e o escapamento, a transferência de calor entre os gases no interior do cilindro e o cabeçote, o pistão, e a camisa do cilindro, e ainda a taxa de combustão ou de liberação de energia do combustível; as equações de conservação de massa e de energia permitem calcular a pressão no cilindro e a transferência de trabalho ao pistão. As simulações de motores que seguem a abordagem termodinâmica são conhecidas como zero-dimensionais (0-D), fenomenológicas ou modelos de enchimento e esvaziamento (Velásquez, 1993).

A predição dos detalhes do campo de escoamento dentro dos motores e dos processos de transferência de calor e de combustão dependentes desses campos através da solução numérica das equações de conservação que os governam tornou-se uma meta realizável a partir da década de 1970. A capacidade de analisar o campo de escoamento em geometrias de motores baseadas em dados reais melhorou gradualmente a partir desta época. Embora as características dinâmicas gerais dos escoamentos na admissão e no escapamento possam ser estudadas de forma proveitosa pela dinâmica de fluidos computacional em regime transitório unidimensional, os escoamentos no interior do cilindro e nos dutos de admissão e escapamento são intrinsecamente transitórios e tridimensionais.

Os aumentos na capacidade de computação a partir da década de 1980 tornaram os cálculos tridimensionais viáveis na prática. Entretanto, eles ainda não são capazes de prever com exatidão todas as características dos processos reais que ocorrem nos motores. As previsões da forma dos escoamentos de gás são as melhores; as do comportamento de combustível pulverizado são menos completas, e os cálculos de combustão apresentam dificuldades consideráveis (Heywood, 1989). Os recentes avanços teriam sido impossíveis sem a ajuda de métodos de projeto assistido por computador

(CAE, do inglês *Computer Aided Engineering*). Termos como “prototipagem virtual” e “ensaios virtuais” são agora usados para descrever a simulação numérica para o projeto e desenvolvimento de novos motores e seus sistemas. Esta nova tendência é impulsionada pelo alto custo dos ensaios de laboratório ou de campo, tanto em termos financeiros quanto de tempo.

Durante a última década as indústrias automotivas têm passado por um período de grandes mudanças, referentes a projeto de motores e desenvolvimento de métodos. O CFD (do inglês, *Computer Fluid Dynamics*) tem-se revelado um grande apoio aos projetos e trabalhos experimentais, tanto para atingir rapidamente os objetivos, como para reduzir os custos de desenvolvimento. Entretanto, a simulação de aplicações industriais reais por CFD pode levar horas ou mesmo semanas, o que nem sempre está de acordo com os tempos de desenvolvimento muito curtos que um novo projeto exige para ser competitivo no mercado (Bella, 2005). Muitos esforços têm sido devotados ao desenvolvimento de métodos de simulação de motores que empregam a dinâmica de fluidos (CFD). As ferramentas CFD de simulação tridimensionais calculam o campo de escoamento espacial, oferecendo uma imagem mais realista dos processos nos motores. Diversas ferramentas de CFD estão acessíveis para simular a operação de motores de combustão interna. A mais popular (principalmente, devido à disponibilidade do código fonte) é a família KIVA de códigos, desenvolvida pelo Laboratório Nacional de Los Alamos. Os *softwares* comerciais tais como o Vectis (da Ricardo Software), o Fire (AVL), o Fluent (Fluent Inc) e Star CD (Computation Dynamics) caracterizam-se pela geração de malha, pré e pós-processamento superiores, assim como pela disponibilidade de suporte especializado ao usuário (Mendera, 2005).

É importante notar que, devido à complexidade e à natureza dos processos nos motores e ao nosso conhecimento limitado, a maioria dos modelos são incompletos; e ainda são necessárias relações e aproximações empíricas. Esta é a razão pela qual os modelos devem atingir um equilíbrio entre complexidade e detalhe. Enquanto os escoamentos e processos no interior do cilindro são inerentemente transitórios e tridimensionais, as características gerais de um motor de combustão interna podem ser estudadas de forma proveitosa por programas de computador unidimensionais. Os modelos de simulação unidimensionais da dinâmica dos gases (1-D CFD) são programas de computador que combinam a abordagem 0-D para os processos no interior do cilindro com a abordagem 1-D para o cálculo das vazões através dos sistemas de admissão e escapamento. A combustão é calculada como processos de liberação de calor, e a troca de calor (na câmara de combustão e nos coletores de admissão e exaustão) é levada em consideração na forma de correlações empíricas. Equações baseadas em experimentos são também empregadas para avaliar as perdas mecânicas, e dessa maneira, torna-se possível avaliar os parâmetros efetivos do motor em desenvolvimento. Em geral, a abordagem 1-D pode ser tratada como um refinamento do método de enchimento e esvaziamento, pois com ela as variações de pressão podem ser estudadas com maior detalhe e precisão (os fenômenos acústicos também podem ser analisados). Os programas 1-D permitem a avaliação de emissões, bem como a plenitude do processo de combustão. Os programas 1-D comerciais mais conhecidos são o GT Power (Gamma Technologies), Boost (AVL) e Wave (Ricardo Software) (Bella, 2005; Mendera, 2005).

Os resultados dos programas 0-D e 1-D podem ser relevantes em dimensionamentos preliminares, auxiliar em trabalhos de investigação, ou ser uma poderosa ferramenta de ensino. As vantagens desta modelagem são economia de tempo e de recursos de computação. Por outro lado, os programas 3-D fornecem resultados bastante precisos e úteis em dimensionamentos mais detalhados, porém o custo de suas licenças é elevado, e

sua complexidade requer recursos de computação intensivos: clusters de vários computadores executando processamento paralelo, exigindo ainda assim um tempo de cálculo que varia desde dias até semanas para cada simulação.

2.2 Descrição do ciclo Otto

Princípio de funcionamento dos motores de combustão interna

A finalidade de um motor de combustão interna de ignição por centelha é transformar a energia acumulada nas ligações químicas de um combustível em trabalho mecânico disponível em seu eixo.

Esta energia química é liberada pela reação do combustível com o ar atmosférico. A combustão é iniciada por uma centelha no interior na mistura, na vela de ignição. As moléculas dos gases gerados pela combustão possuem maior energia cinética do que as moléculas da mistura de ar e combustível que lhes deu origem. Esta diferença deve-se à liberação da energia contida nas ligações químicas dos reagentes, ao se transformarem nos produtos da combustão.

A Equação de Estado dos Gases Perfeitos descreve o estado termodinâmico dos produtos da combustão (Zacharias, 1967):

$$p V = n R T$$

onde

$p V =$ energia cinética translacional das moléculas do gás, associada ao produto de sua pressão e volume [J]

$n =$ número de mols

$R =$ constante universal dos gases [J mol⁻¹ K⁻¹]

$T =$ temperatura [K]

Ela afirma que o produto da pressão p pelo volume V ocupado pelo gás é igual ao produto do número de mols n deste gás por sua temperatura T e pela constante universal dos gases R [J mol⁻¹ K⁻¹]. Assim, a energia armazenada num volume gás é proporcional ao produto do número de mols nele contido pela temperatura absoluta do gás.

Os produtos da combustão se expandiriam à pressão constante e igual à atmosférica se a combustão fosse ao ar livre; entretanto, em motores de combustão interna a combustão ocorre em local confinado. A expansão do volume do cilindro é limitada pela posição do pistão, resultando um aumento simultâneo da pressão e da temperatura dos gases de combustão.

Durante a combustão ocorre a transformação da energia armazenada nas ligações químicas dos reagentes na energia cinética das moléculas dos produtos, equivalente à diferença entre as entalpias de formação da mistura de ar e combustível, e dos gases de combustão. Esta diferença da entalpia se transforma em:

- Energia cinética translacional das moléculas, associada ao produto da pressão p do gás confinado por seu volume V ;
- Energia interna específica u do gás, associada à sua temperatura absoluta T (a temperatura absoluta é uma medida macroscópica da energia cinética translacional,

enquanto a energia interna específica u é uma função das energias translacional, rotacional e vibracional das moléculas do gás) (Loeb, 1961).

A entalpia é simbolizada por h e definida como a soma da energia interna u do gás com a energia cinética translacional de suas moléculas, quantificada macroscopicamente pelo produto $p V$. Portanto, à variação da energia associada às ligações químicas dos produtos e a dos reagentes corresponde uma variação de entalpia equivalente:

$$\Delta h = \Delta u + \Delta (p v)$$

Mas

$$p v = R T$$

onde v é o volume específico molar [m^3/mol]

e então

$$\Delta h = \Delta u + R \Delta T$$

Para transformar a energia térmica associada à entalpia dos gases de combustão em energia mecânica, deve-se transferi-la para o meio externo. Esta transferência é feita ao expandi-los, diminuindo sua pressão interna p_{int} até próximo da externa p_{ext} . Isto é possível se a superfície de uma das fronteiras do sistema for móvel. Neste caso, a diferença entre as pressões em lados opostos da superfície A dará origem a um desequilíbrio de forças, dado pelo produto:

$$F_{res} = (p_{int} - p_{ext}) A$$

O trabalho realizado pela força resultante F_{res} ao deslocar a superfície móvel A ao longo da distância ds transfere a energia dos gases confinados para o exterior do sistema na forma de energia mecânica, descrita pelo produto:

$$dE_{mec} = F_{res} \cdot ds$$

Para que o motor continue funcionando após a expansão dos gases, parte da energia mecânica transferida ao pistão é armazenada num volante preso ao eixo de manivelas. Este permite a continuidade do movimento ao acionar o mecanismo biela-manivela, fazendo o pistão subir expulsando os gases durante a fase de escapamento, descer admitindo nova mistura de ar e combustível e tornar a subir retornando à posição inicial, comprimindo outra vez a mistura recém admitida e dando continuidade ao ciclo. O mecanismo biela-manivela transforma o movimento alternativo retilíneo do pistão em movimento circular do eixo de manivelas, ou virabrequim. Ao trabalho $F ds$ no pistão corresponde o trabalho $\tau d\theta$ no eixo.

O mecanismo de comando de válvulas permite a entrada da mistura de ar e combustível no início da admissão e a saída dos gases de combustão ao final da expansão. A ignição ocorre antes de o pistão atingir o PMS; assim, a combustão inicia enquanto o pistão ainda está subindo e continua após o pistão atingir o PMS e começar a descer, estendendo-se ao longo da expansão enquanto ainda houver combustível para queimar. A atuação conjunta do sistema de controle da centelha e do comando de válvulas faz o motor funcionar num ciclo de quatro tempos: admissão, compressão, expansão e escapamento.

Em 1876 o engenheiro alemão Nikolaus A. Otto construiu o primeiro motor de ignição por centelha a quatro tempos, usando o ciclo proposto pelo francês Alphonse Beau de Rochas em 1862. Em sua homenagem, deu-se o nome de “ciclo Otto” ao ciclo de ar padrão que representa o funcionamento dos motores de ignição por centelha. A invenção do ciclo de dois tempos é atribuída ao engenheiro escocês Dugald Clerk, que patenteou em

1881 o projeto de um motor que tinha um cilindro de carga separado. O motor de lavagem pelo Carter utiliza a área abaixo do pistão como uma bomba de carga, e é creditado aos ingleses Joseph Day e Frederick Cock, que inventou o duto de admissão controlado pelo pistão (http://en.wikipedia.org/wiki/Two-stroke_engine).

O motor a gás atmosférico, o motor construído por Otto e seu diagrama p V estão mostrados na Figura 1.

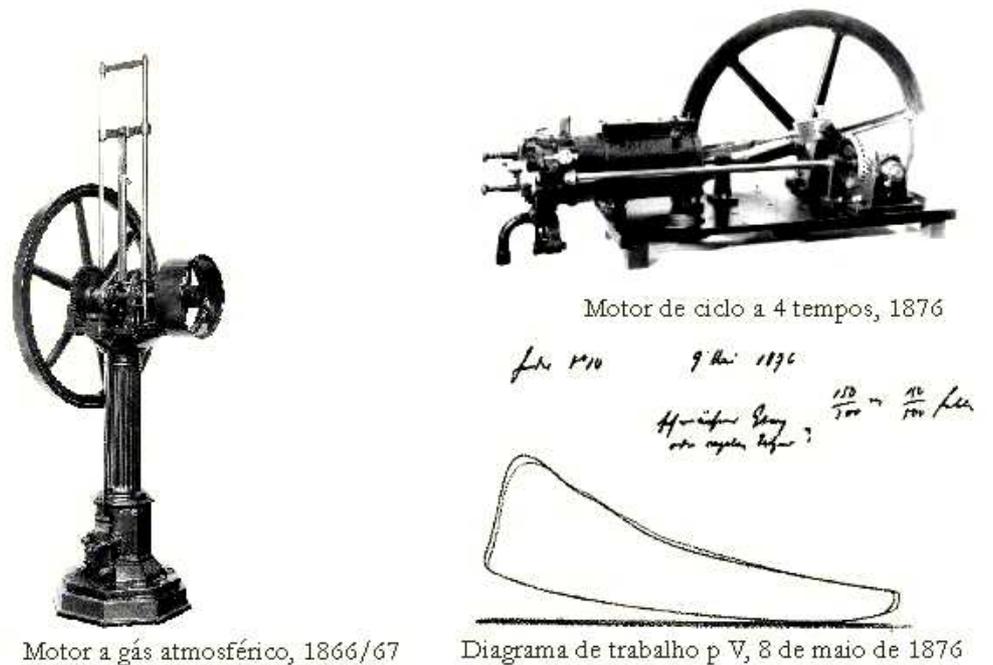


Figura 1 (a): O primeiro motor Otto e seu diagrama p V.

Na América Latina existe um único exemplar em funcionamento do motor fabricado por Otto. A Figura 1 (b) mostra este motor, que se encontra no Museu da Escola de Engenharia da UFRGS em Porto Alegre, RS, Brasil.

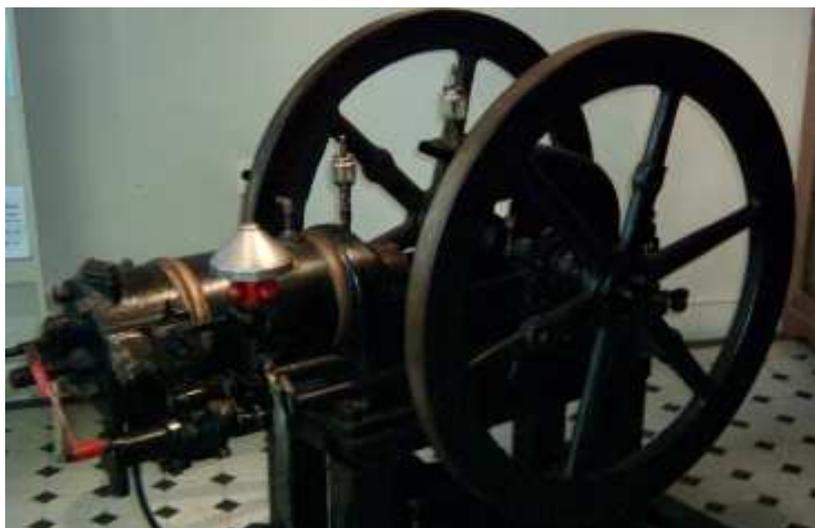


Figura 1 (b): Motor Otto, único exemplar em funcionamento na América Latina.

Mecanismos utilizados no motor de ciclo Otto

As partes móveis de um motor de ciclo Otto podem ser vistas na Figura 2. O mecanismo biela-manivela permite a ligação dos pistões com o eixo de manivelas, transformando movimento alternativo em rotativo. Em cada cilindro existe uma válvula de admissão, uma válvula de escapamento e uma vela de ignição. Um eixo de comando coordena a abertura das válvulas de admissão e escapamento (não mostrado na Figura 2). O sistema de ignição determina o ângulo de disparo da centelha nas velas, e pode ser eletrônico ou mecânico (não mostrado na Figura 2).

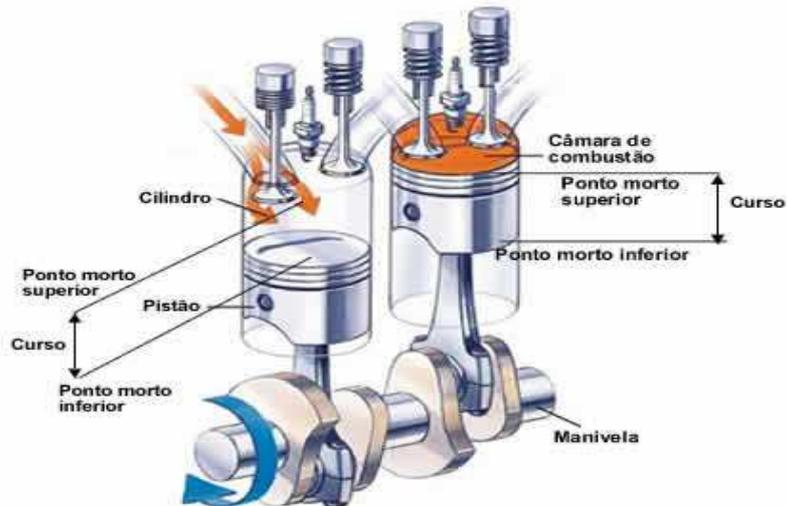


Figura 2: Vista em perspectiva das partes móveis do motor (Fonte: <http://educacao.uol.com.br/fisica/ult1700u62.jhtm>).

O perfeito sincronismo entre os diversos mecanismos do motor Otto permite a conversão do movimento alternativo dos pistões em rotativo, e a continuidade do processo de transformação de energia térmica em mecânica. O volume da câmara de combustão é fixo e equivalente à soma das concavidades existentes no cabeçote e no topo do pistão, enquanto o volume deslocado pelo pistão é variável. Para desenvolver o modelo termodinâmico de combustão, são definidos dois volumes de controle que abrangem todo o cilindro: um deles compreende o volume preenchido pelos gases de combustão; o outro abrange o volume que contém a mistura de ar e combustível ainda não queimado. O volume total do cilindro é simultaneamente igual à soma do volume fixo com o deslocado pelo pistão, e à soma dos volumes de controle que contêm os produtos e os reagentes da combustão.

Para transformar a entalpia dos gases em energia mecânica, uma das superfícies do volume onde ocorre a combustão é móvel. Esta superfície é o topo do pistão, cuja face inferior está exposta à pressão atmosférica. O desequilíbrio de forças devido à diferença de pressão atuante sobre o topo e a face inferior do pistão dá origem a seu movimento. O pino do pistão está ligado a uma biela, cuja outra extremidade está ligada ao eixo de manivelas. Este mecanismo biela-manivela transforma o movimento alternativo do pistão em rotativo do eixo do motor. O volante montado sobre o eixo armazena energia cinética, permitindo o retorno do pistão ao ponto inicial e a continuidade do ciclo.

A abertura das válvulas de admissão e de escapamento é coordenada pelo sistema de comando de válvulas, que consiste de um eixo de cames ou ressaltos acionado pelo eixo de manivelas através de uma redução, girando à metade da velocidade do virabrequim e trabalhando em conjunto com o sistema de ignição. Os gases de combustão saem pelas válvulas de escapamento, e a mistura de ar e combustível entra pelas válvulas de admissão. Uma mola de retorno faz as válvulas fecharem após a passagem do ressaltos. A sincronia dos diversos mecanismos permite a continuidade do ciclo

Para tornar o torque no eixo mais uniforme e reduzir as vibrações torsionais no eixo, os motores Otto podem ser construídos com diversos pistões.

2.2.1 Descrição das fases do motor

A continuidade do processo de transformação de energia térmica em mecânica num motor a combustão interna é efetivada por mecanismos que transformam o movimento alternativo do pistão em rotativo do eixo de manivelas.

Cada pistão de um motor de ciclo Otto percorre quatro cursos dentro do cilindro enquanto seu virabrequim completa duas voltas, a cada ciclo termodinâmico. Os quatro tempos ou fases de funcionamento do motor funcionando conforme o ciclo Otto, mostrados de forma esquemática na Figura 3, são:

- primeiro tempo ou fase de admissão;
- segundo tempo ou fase de compressão;
- terceiro tempo ou fase de expansão;
- quarto tempo ou fase de escapamento.

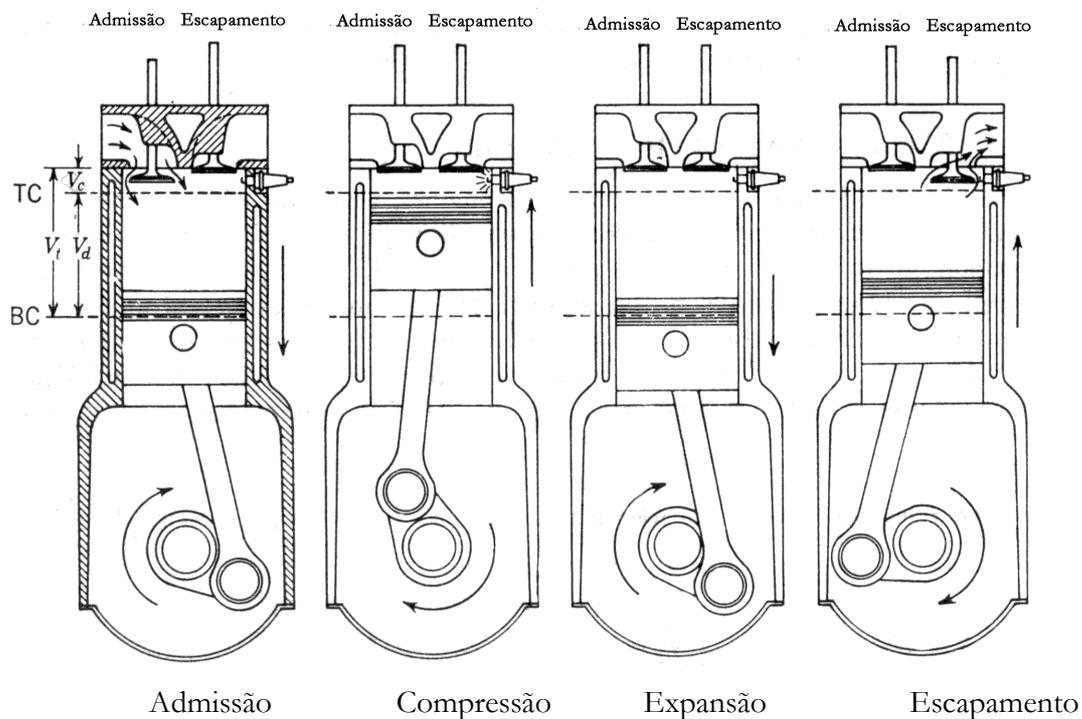


Figura 3: Os quatro tempos do ciclo Otto (Heywood, 1989).

Primeiro tempo: fase de admissão

Inicialmente, a válvula de admissão se abre (i.v.o., do inglês *intake valve opens*), um pouco antes do PMS (Ponto Morto superior), enquanto a válvula de escapamento ainda está aberta. A válvula de escapamento se fecha um pouco além do PMS, permanecendo fechada durante o restante do curso do pistão. O pistão se desloca desde o PMS até o PMI com a válvula de admissão aberta, fazendo o volume do cilindro aumentar enquanto a pressão no interior do cilindro varia pouco, ficando ligeiramente abaixo da pressão atmosférica e sugando mistura fresca de ar e combustível para o interior do cilindro. A massa de gases no cilindro aumenta à medida que o pistão desce. Um pouco depois do pistão passar por sua posição mais baixa (PMI, Ponto Morto Inferior) a válvula de admissão se fecha, marcando o fim da admissão e o início da compressão.

Segundo tempo: fase de compressão

Durante a compressão o pistão sobe desde uma posição próxima ao ponto morto inferior (i.v.c.) até o PMS enquanto as válvulas ficam fechadas, comprimindo a mistura de ar, combustível e gases residuais. A pressão no interior do cilindro aumenta de acordo com a Equação de Estado dos gases ideais e a Primeira Lei da Termodinâmica.

Terceiro tempo: fase de expansão ou tempo motor do ciclo

A ignição ocorre pouco antes de o pistão atingir sua posição mais alta (PMS), quando a centelha na vela inflama a mistura de ar e combustível. A pressão e a temperatura no interior do cilindro aumentam rapidamente, à medida que a combustão se desenvolve liberando a energia térmica pela reação do combustível com o ar. À medida que o pistão desce aumentando o volume do cilindro, os gases da combustão se expandem de acordo com a Primeira Lei e a Equação de Estado dos gases ideais, convertendo parte de sua energia térmica em trabalho mecânico neste que é o único tempo motor do ciclo. A alta pressão dos gases no interior do cilindro força o pistão para baixo, fazendo o virabrequim girar e produzindo trabalho útil. Ao final da expansão o pistão está próximo à sua posição mais baixa (PMI), e o cilindro está cheio de produtos da combustão.

Quarto tempo: fase de escapamento

Quando a válvula de escapamento se abre os gases de combustão começam a ser expelidos, a pressão no interior do cilindro cai até próximo da atmosférica e o pistão torna a subir, diminuindo o volume do cilindro e continuando a expelir os gases residuais através da válvula de escapamento até o pistão atingir o ponto morto superior, quando se reinicia o ciclo. A pressão no interior do cilindro permanece ligeiramente acima da atmosférica durante a fase de escapamento, e ligeiramente abaixo da atmosférica durante a fase de compressão (Nag, 2005).

A representação do ciclo Otto completo pode ser analisada na forma do diagrama p V mostrado na figura 4, onde:

- EVO ponto de abertura e EVC o ponto de fechamento da válvula de escapamento;
- IVO ponto de abertura e IVC o ponto de fechamento da válvula de admissão;
- V_c volume da câmara de combustão,
- V_d volume deslocado pelo pistão.

Neste diagrama, o trabalho teórico total produzido durante um ciclo corresponde à área interna do diagrama. Na forma matemática pode-se escrever:

$$W = \oint p \, dV$$

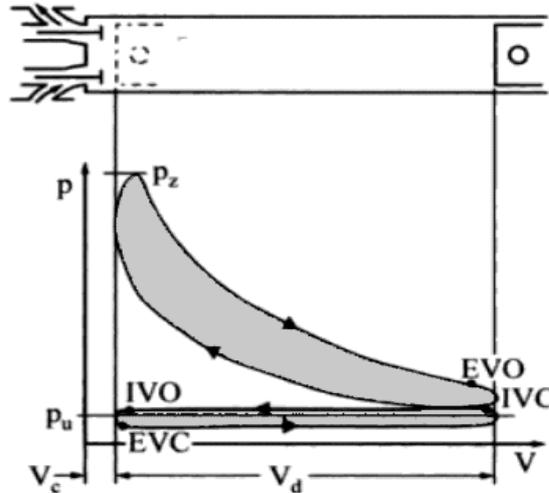


Figura 4: Diagrama p V do ciclo Otto real (Stiesch, 2006)

As eficiências dos motores reais não ultrapassam cerca de 70% da eficiência teórica do ciclo Otto ideal. As razões para esta diferença são:

1. O aumento do calor específico dos produtos da combustão a temperaturas maiores, de modo que a temperatura real atingida após a combustão é menor que a teórica;
2. Perda de energia para as paredes do cilindro, que são arrefecidas por água ou ar. Se as paredes do cilindro não forem arrefecidas, a temperatura do cilindro sobe demais, causando pré-ignição e detonação, e por fim o engripamento do pistão. A perda de energia depende do instante em que a mistura de ar e combustível é inflamada, da velocidade de propagação da chama através do cilindro, e da intensidade da turbulência da mistura;
3. Produtos da combustão tais como o dióxido de carbono e o vapor d'água se dissociam consideravelmente, se a temperatura subir além de 2000 °C. Uma vez que a dissociação é uma reação endotérmica, a temperatura máxima obtida na realidade é menor que aquela que seria atingível sem a dissociação, reduzindo a eficiência do ciclo;
4. A película de gás em contato com as paredes relativamente frias do cilindro pode nem queimar;
5. O processo de combustão teórico é instantâneo, e a volume constante. Isto não pode ocorrer na prática, uma vez que a combustão sempre precisa de um intervalo de tempo finito para se completar. O aumento da pressão no ciclo real, portanto, não é instantâneo;
6. No ciclo de quatro tempos, os processos de admissão e escapamento nunca ocorrem sem perda de carga nas válvulas. Portanto, eles traçam um laço negativo no diagrama, ou seja, o pistão absorve trabalho mecânico durante o processo de bombeamento;

7. A abertura gradual da válvula de escapamento e a saída de gases devida a esta abertura não são um processo a volume constante. Portanto, o diagrama $p-V$ aparece arredondado, sem cantos abruptos durante o escapamento;
8. Os processos supostos isentrópicos no ciclo Otto não serão nem mesmo estritamente adiabáticos, por causa da baixa temperatura das paredes do cilindro. Além disso, o atrito entre o pistão e o cilindro está presente em todos os processos, tornando-os irreversíveis (Nag, 2005).

2.2.2 Descrição das variáveis termodinâmicas

Pressão no interior do cilindro

O processo de combustão real não ocorre nem de forma instantânea nem a volume constante, uma vez que a combustão exige um tempo finito para se completar e, portanto, o aumento de pressão no ciclo real também não é instantâneo. O diagrama pressão *versus* volume relativo do ciclo Otto real, obtido a partir de dados experimentais com o motor CFR operando com combustível isoctano em condições estequiométricas, pode ser visto na Figura 5.

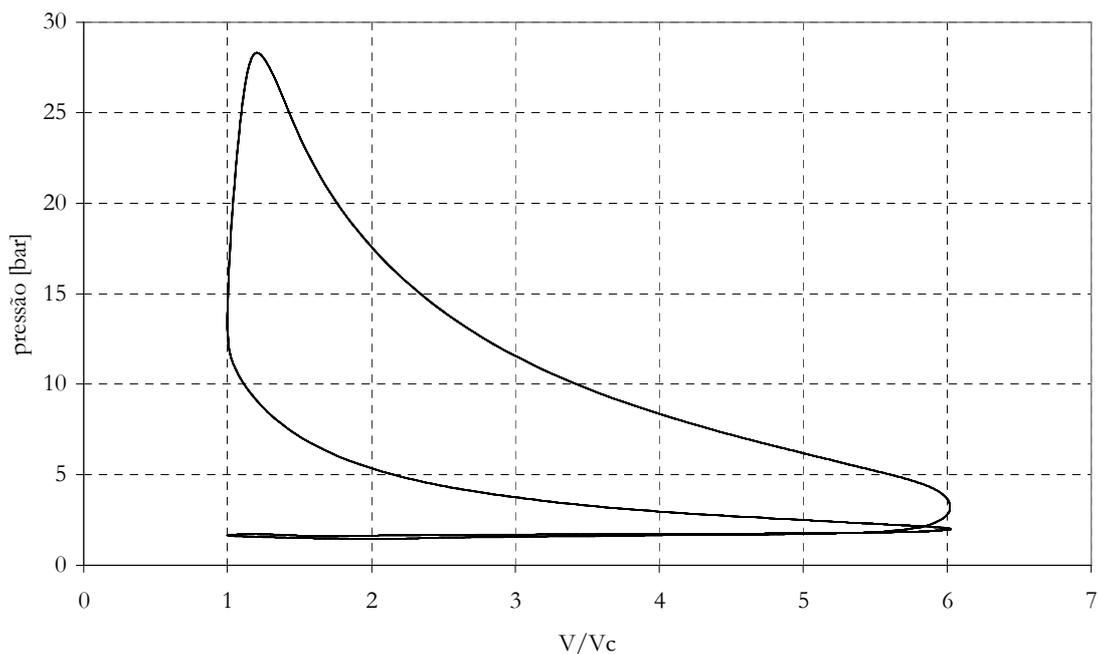


Figura 5: Diagrama $p-V/V_c$ traçado a partir de dados experimentais do motor CFR operando com combustível isoctano em condições estequiométricas.

Os processos de admissão e escapamento ocorrem com perda de carga através das válvulas, traçando um laço negativo no diagrama $p-V$, ou seja, o pistão absorve trabalho mecânico durante o processo de bombeamento dos gases.

A abertura gradual da válvula de escapamento e a saída de gases do interior do cilindro decorrente desta abertura não ocorrem como um processo a volume constante; portanto, o traçado do diagrama p V durante o escapamento ocorre sem variações abruptas.

Temperatura no interior do cilindro

No ciclo Otto ideal,

- a temperatura durante as fases de compressão e expansão evolui como um processo adiabático e, durante as fases de admissão e escapamento, como um processo isovolumétrico. Assim, as trocas de calor com o ambiente são modeladas considerando o calor fornecido ou retirado do fluido de trabalho a volume constante, com o pistão parado no PMS ou PMI, sem que haja trocas de massa com o ambiente;
- a temperatura ao final da compressão é aquela resultante da compressão adiabática da mistura, desde o volume máximo até o mínimo do cilindro. Portanto, ela é uma função da taxa de compressão do motor;
- a temperatura ao final da combustão é uma função do poder calorífico da mistura de ar e combustível, e de seu calor específico a volume constante;
- a temperatura ao final da expansão é a resultante da expansão adiabática dos gases de combustão desde o volume mínimo até o máximo do cilindro, a qual inicialmente estava à temperatura final de combustão. Portanto, ela é uma função da taxa de compressão do motor, do poder calorífico da mistura de ar e combustível, e de seu calor específico a volume constante.

No ciclo Otto real,

- o calor específico dos produtos da combustão aumenta com a temperatura, tornando a temperatura após a combustão menor que a do ciclo ideal;
- existem trocas de calor com as paredes do cilindro, que são arrefecidas por água ou ar para manter sua temperatura dentro de limites aceitáveis. As perdas de energia devidas a isto dependem do avanço da ignição, da velocidade de propagação da chama e da intensidade da turbulência;
- a dissociação do dióxido de carbono e do vapor d'água acima de 2000 °C é apreciável e, sendo uma reação endotérmica, reduz a temperatura máxima de reação e a eficiência do ciclo;
- a película de gás em contato com as paredes do cilindro pode não queimar;
- os processos isentrópicos no ciclo Otto ideal não são nem sequer adiabáticos no ciclo real, devido à baixa temperatura das paredes do cilindro e das perdas por atrito que os torna irreversíveis.

Massa de ar, de combustível e de gases residuais

Durante a admissão, enquanto o pistão se desloca em direção ao PMI com a válvula de admissão aberta, a pressão no interior do cilindro fica um pouco abaixo da pressão

atmosférica e a massa no interior do cilindro aumenta, à medida que a mistura de ar e combustível é succionada do coletor de admissão para o interior do cilindro.

A partir do instante em que a válvula de admissão fecha, cessam as trocas de massa com o meio externo. A massa no interior do cilindro permanece constante durante a compressão, combustão e expansão, até o instante em que a válvula de escapamento se abre, quando o pistão está próximo ao PMI.

Durante o processo de exaustão os gases de escapamento são expelidos, inicialmente pela diferença de pressão entre o cilindro e o coletor de escapamento, e, logo após, pelo deslocamento do pistão em direção ao PMS, causando a redução da massa no interior do cilindro. Ao final deste processo, resta um volume de gases residuais no volume da câmara de combustão que permanecerão no cilindro ao longo do próximo ciclo, que se inicia com a abertura da válvula de admissão.

O volume do cilindro e a massa de gases no seu interior durante as fases de escapamento, admissão e compressão do motor CFR está mostrado na Figura 6. O volume do cilindro e a massa de gases em seu interior foram traçados a partir dos resultados da simulação do modelo de escapamento, admissão e compressão do motor CFR, com a taxa de compressão do modelo igual 6,01.

Nota-se que enquanto as válvulas estão fechadas, a massa permanece constante à medida que o volume do cilindro varia; e enquanto as válvulas estão abertas, a massa varia de acordo com o volume do cilindro. Também se nota um atraso na forma de onda da massa em relação à do volume durante a admissão; em contraste com a forma de onda da massa durante o escapamento, que está avançada em relação à do volume.

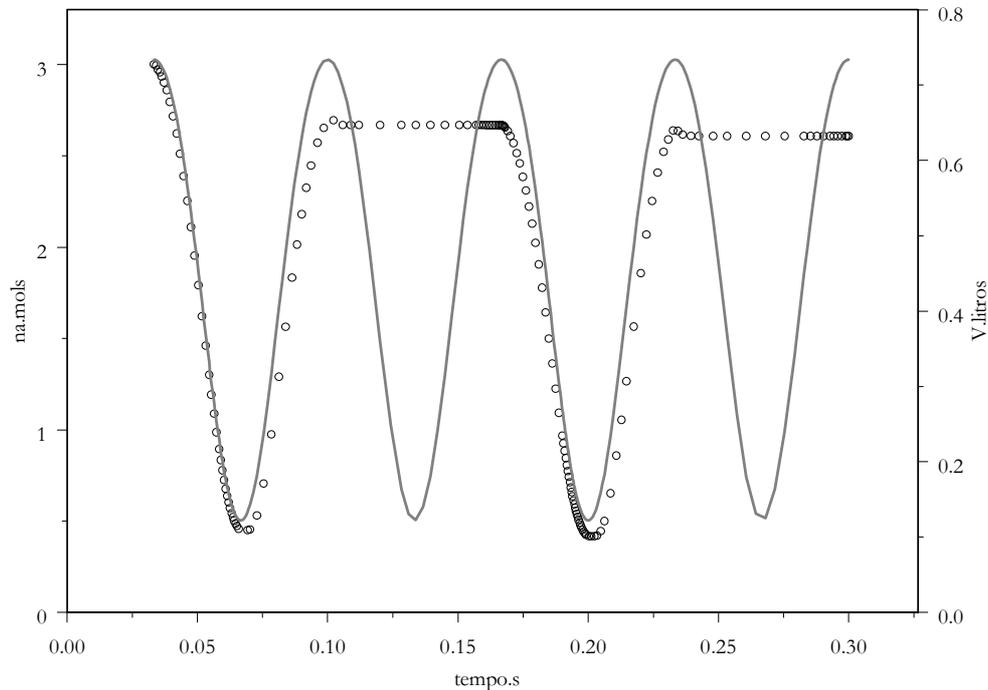


Figura 6: Volume do cilindro (linha sólida) e a massa de gases no seu interior durante as fases de escapamento, admissão e compressão do motor CFR, determinado pela integração do modelo termodinâmico de escapamento, admissão e compressão do motor CFR.

2.3 Desenvolvimento das equações diferenciais

Será desenvolvido um modelo termodinâmico de duas zonas para representar o tempo de combustão e expansão, e outro para representar os demais tempos: admissão, compressão, e escapamento.

Os modelos consistirão de um conjunto de equações diferenciais baseadas na equação de estado dos gases ideais e na Primeira Lei da Termodinâmica, na geometria e cinemática do cilindro, e na conservação de massa e energia.

Uma vez resolvidos os sistemas e integradas as equações diferenciais que os compõem, estes modelos permitirão calcular a evolução da fração de massa queimada em função do tempo, a partir do conhecimento da curva de pressão; ou então a curva de pressão, a partir do conhecimento da evolução da fração de massa queimada em função do tempo.

2.3.1 Hipóteses assumidas

Hipóteses de Annand

As principais hipóteses propostas por Annand são:

1. A carga original de combustível é homogênea
2. A pressão é uniforme ao longo do cilindro a qualquer tempo
3. O volume ocupado pela zona de reação da chama é desprezível
4. Os gases queimados estão em equilíbrio termodinâmico pleno
5. Os gases não queimados estão congelados em sua composição original
6. Tanto os gases queimados quanto os não queimados têm calores específicos espacialmente uniformes
7. Não há troca de calor entre a zona queimada e a não queimada

Apesar deste modelo ser simplificado, a experiência mostra que as hipóteses acima são bem justificadas (Benson, 1975).

Ao formular a hipótese 1, considera-se que todo o combustível entra no cilindro na fase gasosa, e misturado ao ar de modo perfeito.

A hipótese 6 implica que a pressão e temperatura sejam uniformes através de todo o volume da zona queimada.

A hipóteses 2, 3 e 4 são justificadas porque as velocidades das reações produtoras de energia na zona ocupada pelos gases de combustão são tão elevadas que os gases nela contidos estão próximos ao equilíbrio termodinâmico, e a velocidade de deslocamento do pistão no cilindro é muito menor que a velocidade de propagação do som nos gases de combustão e na mistura não queimada.

A composição da mistura de gases de combustão no interior do cilindro é determinada admitindo-se equilíbrio termodinâmico pleno. Uma vez que o cálculo do equilíbrio é iterativo, é necessário estimar a pressão no cilindro e a temperatura na zona queimada para alcançar a convergência do método numérico.

Hipótese da validade do modelo de Wiebe para a combustão

Considera-se que a função de Wiebe representa bem a evolução no tempo da fração de massa dos gases queimados.

A finalidade desta função é reproduzir o perfil em forma de S, típico da integral da liberação de calor de motores de ignição por centelha. A razão entre o calor liberado até um dado ângulo θ do virabrequim e o total de calor liberado ao final da combustão pode ser aproximada por

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

onde

- θ_0 é a posição angular do virabrequim no início da combustão;
- θ_f é a posição angular do virabrequim no final da combustão;
- m é o fator de forma, que define a forma da curva de liberação de calor;
- a é o parâmetro de eficiência, que determina a fração de combustível queimada ao final da combustão.

Estimativas razoáveis para o fator de forma e o parâmetro de eficiência são $a = 2$ e $m = 5$, que reproduzem bem as curvas de pressão para uma ampla variedade de condições de funcionamento dos motores Otto (Heywood, 1989; Shiao, 1995; Ghojel, 2010).

A taxa de liberação de calor instantânea é obtida pela derivação da Equação (1) em relação à posição angular do virabrequim.

$$\frac{df_b}{d\theta} = (1 - f_b) \frac{(m+1)a}{\theta_f - \theta_0} \left(\frac{\theta - \theta_0}{\theta_f - \theta_0}\right)^m \quad (2)$$

Para o volume de controle mostrado nas Figuras 7 e 8, as taxas de liberação de calor instantânea e integral são determinadas pelas equações (1) e (2), respectivamente, e graficadas em função da duração da combustão normalizada para vários valores do parâmetro de forma m . As taxas de liberação de energia de motores de ignição por centelha de mistura homogênea são bem reproduzidas pela função de Wiebe (Stiesch, 2003)

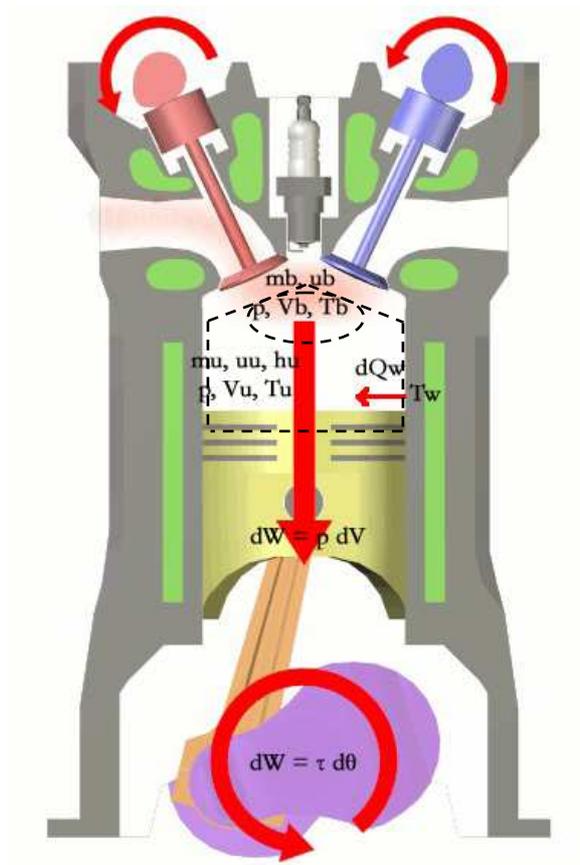


Figura 7: Volumes ocupados pelas zonas queimada e não queimada durante a combustão.

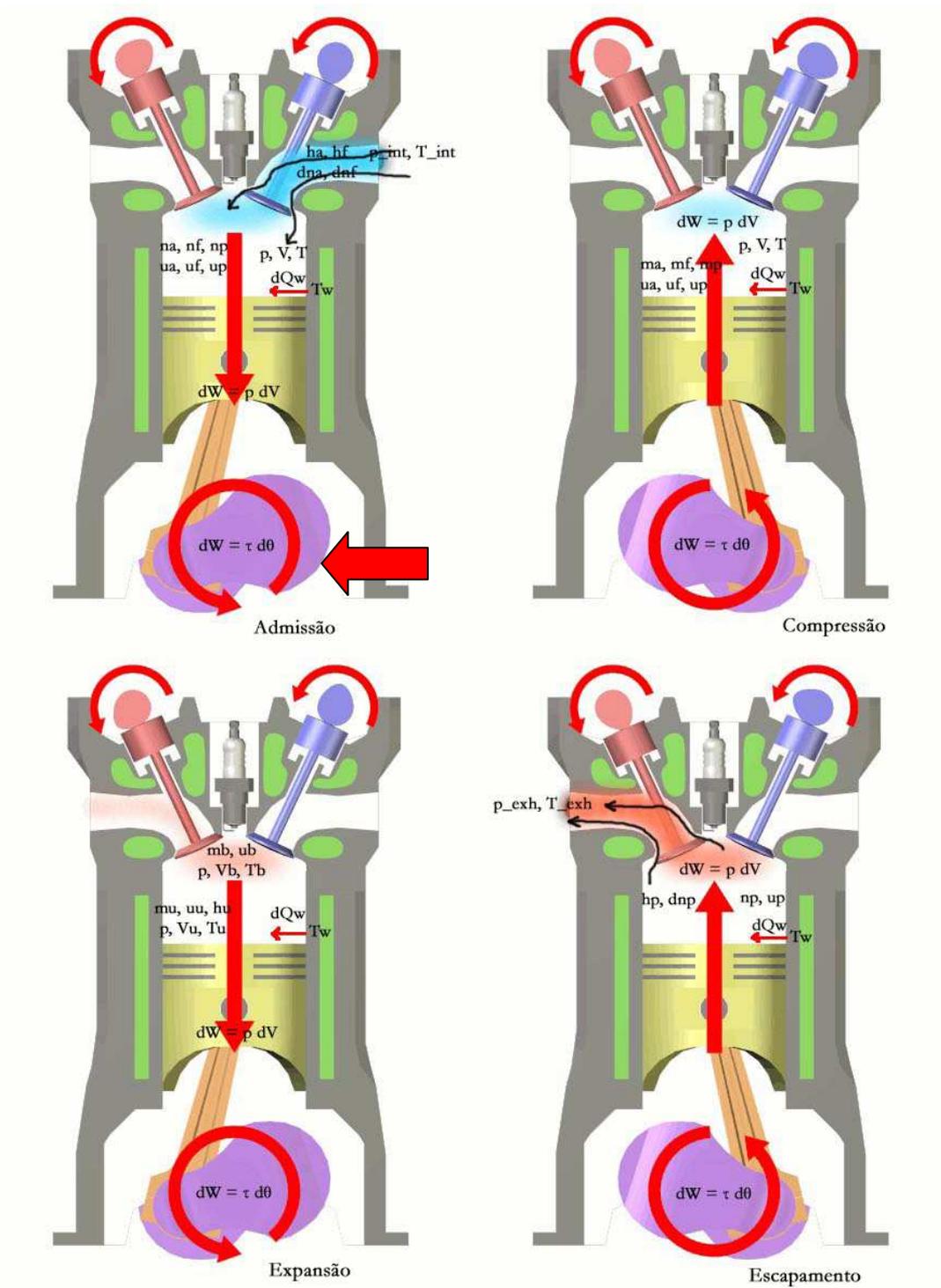


Figura 8: Volumes de controle durante as fases do ciclo Otto

A Figura 9 ilustra os perfis de combustão de Wiebe, para vários parâmetros de forma. Já a Figura 10 ilustra a pressão, o volume e a fração de massa queimada, em função da posição angular do virabrequim e das fases do ciclo.

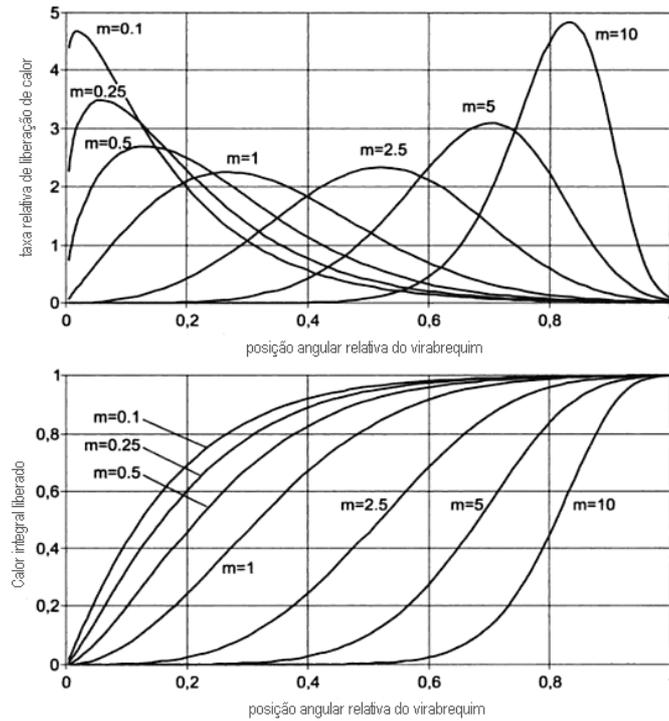


Figura 9: Perfis de combustão de Wiebe para vários parâmetros de forma (Stiesch, 2006)

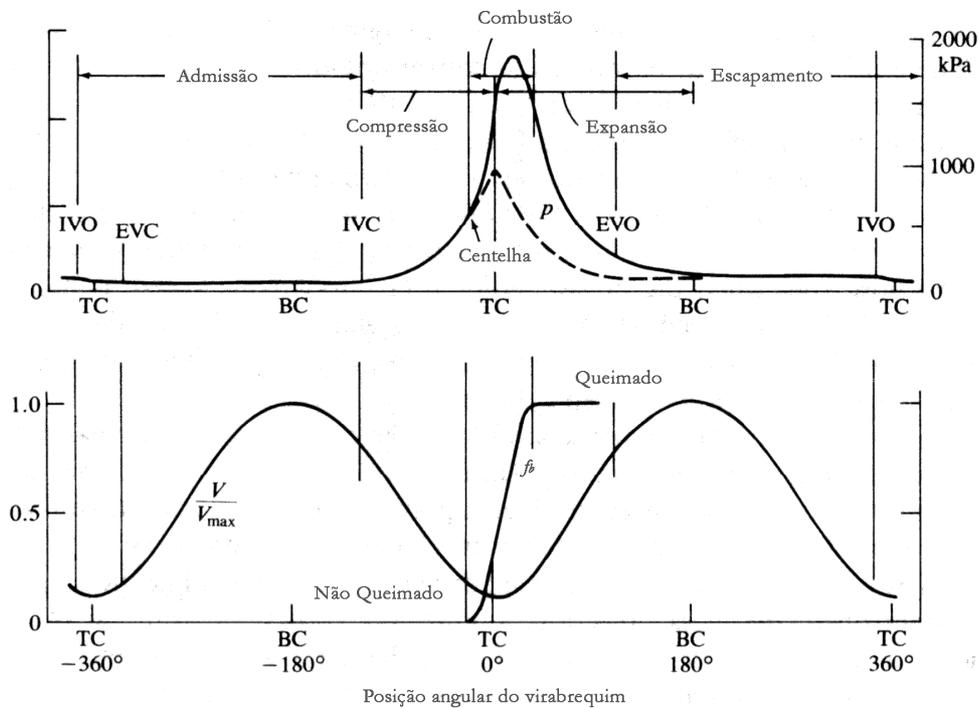


Figura 10: Pressão, volume e fração de massa queimada; em função da posição angular do virabrequim e das fases do ciclo Otto (Heywood, 1989).

Hipótese de Borman

Conforme proposto por Borman (Borman, 1975), considera-se que a mistura de gases de combustão é homogênea, comportando-se como uma mistura de 12 espécies químicas em equilíbrio termodinâmico, às quais se atribui os seguintes índices: (Velásquez, 1993)

1. H
2. O
3. N
4. H₂
5. OH
6. CO
7. NO
8. O₂
9. H₂O
10. CO₂
11. N₂
12. Ar

Em consequência destas hipóteses, os gradientes de temperatura, as ondas de pressão, as composições em não-equilíbrio, a atomização e a vaporização de combustível devem ser ignorados (Krieger, 1966).

Hipótese da validade da equação de estado dos gases ideais

Considera-se que a equação de estado dos gases ideais descreve o volume ocupado por cada zona, o que significa desprezar os efeitos da compressibilidade que ocorrem próximo à pressão e temperatura críticas.

Esta hipótese é justificada pelo trabalho de Zacharias (1967), que utilizou uma forma modificada da equação de estado de Beattie-Bridgeman, incluindo até o segundo coeficiente virial, para calcular as propriedades dos produtos de combustão. Os resultados por ele obtidos mostram que o fator de compressibilidade é essencialmente unitário, na faixa de pressões e temperaturas em que os motores de combustão interna operam. Lapuerta *et al.* (2006) investigaram a influência de diversas equações de estado sobre o diagnóstico termodinâmico dos motores diesel e concluíram que as divergências em relação ao modelo de gás ideal são pouco significativas.

Hipótese da validade do modelo de transferência de calor de Woschni

As variações de temperatura e pressão que o fluido de trabalho sofre e o escoamento tridimensional, transitório e turbulento a que está sujeito dão origem à complexidade da transferência de calor às superfícies do cilindro, pistão e cabeçote, um fenômeno de natureza não estacionária e tridimensional.

Qualquer abordagem detalhada do problema é extremamente difícil, devido à incessante variação das propriedades termofísicas do fluido e à presença de fronteiras móveis e de geometrias complicadas, do lado dos gases e do sistema de arrefecimento (Velásquez, 1993).

A saída adotada pelos modeladores é utilizar correlações simples obtidas a partir de dados experimentais, que permitem determinar o coeficiente de transferência de calor em função de propriedades do fluido e de parâmetros que caracterizam as dimensões do motor, a hidrodinâmica do escoamento no cilindro e as peculiaridades do processo de combustão.

Admite-se que a camada limite térmica seja extremamente fina e que possua capacidade térmica desprezível, permitindo adotar a hipótese de que o fluxo de calor na parede seja proporcional à diferença de temperatura entre o gás e o fluido.

As correlações propostas por Annand e por Woschni são as mais frequentemente citadas na literatura (Heywood, 1989).

Considera-se que a troca de calor entre as paredes e os gases contidos no interior do cilindro é descrita pela fórmula de Woschni (Woschni, 1967):

$$h_c = 3.26 B^{-0.2} p^{0.8} T^{-0.55} w^{0.8} \quad (3)$$

onde

h_c é o coeficiente de transferência de calor, $W m^{-2} K^{-1}$

w é a velocidade característica, calculada pela equação (4), m/s

B é o diâmetro do cilindro, m

p é a pressão absoluta no cilindro, kPa

T é a temperatura do fluido, K

Substituindo $p(\text{kPa}) = 100 p(\text{bar})$ em (3), obtém-se

$$h_c = 129.8 B^{-0.2} p^{0.8} T^{-0.55} w^{0.8} \quad (3.a)$$

onde

p é a pressão absoluta no cilindro, bar

as demais unidades estão no sistema MKS.

$$w = c_1 \cdot S_p + c_2 \cdot \frac{V \cdot T_1}{P_1 \cdot V_1} (p - p_0) \quad (4)$$

onde

c_1 é uma constante de ajuste, no motor ensaiado por Woschni igual a 6,18 para os processos de admissão e escapamento ou 2,28 para os processos de compressão e expansão;

c_2 é uma constante de ajuste, igual a $3,24 \cdot 10^{-3}$ no motor ensaiado por Woschni;

p é a pressão instantânea dos gases no cilindro, kPa;
 p_0 é a pressão instantânea dos gases no cilindro, quando o motor é acionado eletricamente;
 T_1, p_1, V_1 são a temperatura, pressão e volume no cilindro, em um determinado ponto do ciclo, em que as válvulas de admissão e escapamento estejam fechadas – por exemplo, no instante em que a válvula de admissão acaba de fechar, iniciando o tempo de compressão.

Da equação de estado dos gases ideais,

$$\frac{p_1 V_1}{T_1} = n\bar{R} \quad (5)$$

onde n é o número total de mols no interior do cilindro, portanto

$$w = c_1 \cdot S_p + c_2 \cdot \frac{(p - p_0)V}{(n_a + n_f + n_p + n_b)\bar{R}} \quad (6)$$

Supondo que quando o motor está queimando combustível a pressão no interior do cilindro no final da compressão é igual à pressão na mesma posição angular do virabrequim quando o motor é acionado por motor elétrico e fazendo $p_1 = p_0$, pode-se escrever

$$w = c_1 \cdot S_p + c_2 \cdot \frac{V \cdot T_0}{p_0 \cdot V_0} (p - p_0) = c_1 \cdot S_p + c_2 \cdot \frac{V}{V_0} T_0 \left(\frac{p}{p_0} - 1 \right) \quad (7)$$

Supondo que a compressão seja um processo politrópico com expoente igual a n , resulta

$$w = c_1 \cdot S_p + c_2 \cdot \frac{V \cdot T_0}{p_0 \cdot V_0} (p - p_0) = c_1 \cdot S_p + c_2 \cdot \frac{V}{V_0} T_0 \left(\left(\frac{V}{V_0} \right)^{-n} - 1 \right) \quad (8)$$

Esta é uma aproximação da Equação (4), que não exige o conhecimento prévio da curva de pressão do motor acionado eletricamente.

Hipótese da validade do modelo de transferência de calor de Annand

Annand (1963) revisou boa parte das correlações para o coeficiente pelicular existentes até 1963 e mostrou que a maioria delas eram dimensionalmente incorretas ou apresentavam termos provenientes de deduções errôneas. Além disso, Annand analisou estatisticamente um grande número de dados experimentais de temperatura das paredes que confinam o gás, chegando à conclusão de que a transferência de calor por convecção é representada adequadamente pela expressão

$$Nu = a Re^b \quad (9)$$

Considera-se que a transferência de calor entre os gases e as paredes do cilindro ocorre de maneira uniforme ao longo da superfície das paredes, e é descrita pela fórmula de Annand.

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{k a A}{B} Re^b \quad (10)$$

onde a é a constante de Annand para troca de calor por convecção.

Esta hipótese permite modelar a troca de calor dos gases contidos no cilindro com as paredes em função da área total da superfície interna das paredes e da temperatura média dos gases (Annand, 1963).

Hipótese da rigidez das partes móveis e da não influência do movimento das válvulas sobre o volume do cilindro

Para simplificar a determinação da área da superfície das paredes e do volume interno do cilindro considera-se as paredes do cilindro, o cabeçote, o pistão e as válvulas rígidos, desprezando quaisquer deformações causadas por forças inerciais, pressão, ou dilatação térmica.

Considera-se desprezáveis as variações de volume do cilindro devidas ao movimento das válvulas. Esta hipótese é justificada, porque durante os tempos de compressão e expansão as válvulas estão fechadas, e portanto imóveis, e durante os tempos de admissão e escapamento, quando estão abertas, as variações de pressão no cilindro são pequenas.

Isto permite a determinação de áreas e volumes, apenas em função de parâmetros geométricos do cilindro e do mecanismo pistão-biela-manivela.

Hipótese da vedação perfeita, ou do vazamento nulo de gases da câmara de combustão

Considera-se a vedação dos anéis e das válvulas de admissão e escapamento perfeitas, isto é, que não haja vazamento de gases pela folga na extremidade dos anéis (*gap*), por entre o pistão e as paredes do cilindro (*blowby*), ou pelas válvulas. Portanto, a massa dos gases no interior do cilindro pode ser considerada constante enquanto as válvulas de admissão e escapamento estiverem fechadas.

Hipótese da velocidade angular constante do virabrequim

Considera-se a velocidade angular do virabrequim constante, desprezando-se os efeitos das vibrações torsionais do virabrequim causadas pela combinação do caráter pulsativo do torque do motor e da inércia finita do volante.

O ângulo θ da manivela do virabrequim em relação ao PMS no sentido horário, em radianos, pode ser então determinado pela equação

$$\theta = \omega t \quad (11)$$

onde ω é a velocidade angular do virabrequim, em rad/s

A Figura 11 mostra os volumes de controle no cilindro.

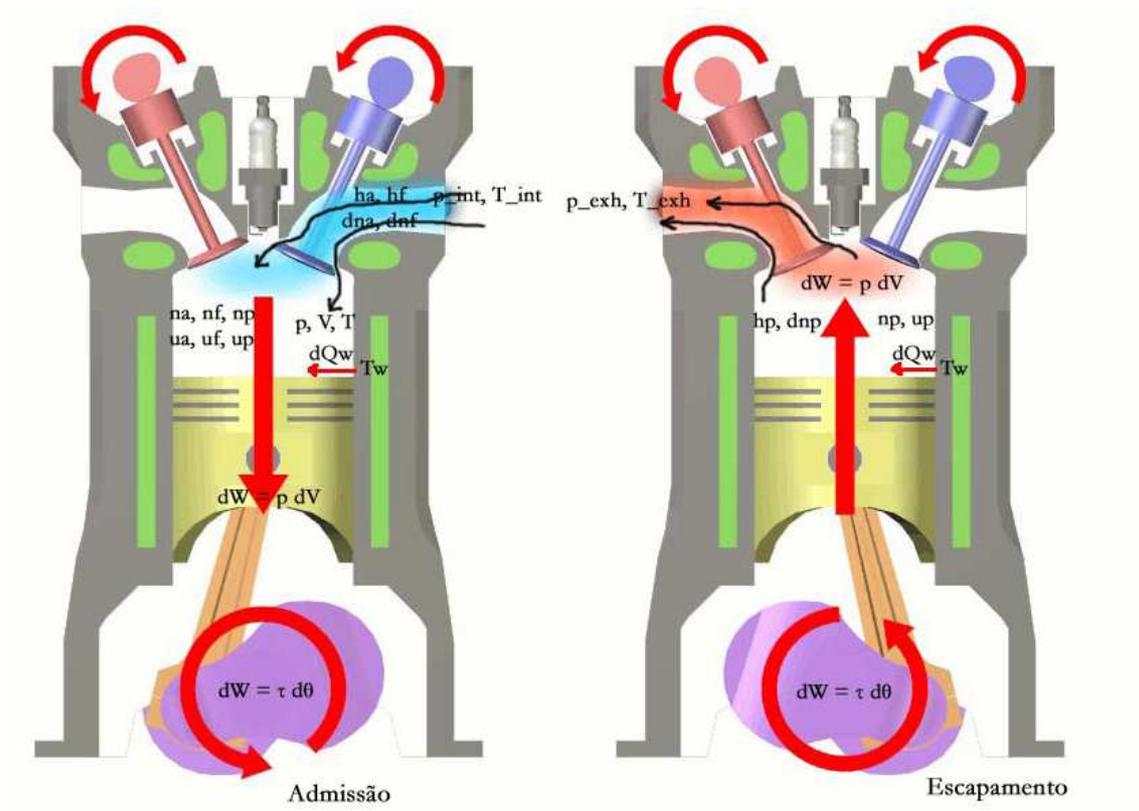


Figura 11: Volumes e superfícies de controle no cilindro

2.3.2 Modelo dos processos de escapamento, admissão e compressão

- A composição dos gases contidos no cilindro é fixa, uma vez que por hipótese não ocorrem reações químicas durante estes processos;
- O volume de controle é o próprio volume do cilindro V , fechado quando as válvulas de admissão e escapamento estiverem fechadas e aberto quando pelo menos uma delas estiver aberta;
- A abertura da válvula de admissão permite a entrada de ar e combustível no cilindro, ou a saída de mistura de ar, combustível e gases residuais contida no cilindro para o coletor de admissão;
- A abertura da válvula de escapamento permite a saída de produtos da combustão do cilindro para o coletor de escapamento, ou seu retorno para o cilindro;
- Por hipótese, o combustível entra no cilindro no estado gasoso e é dosado proporcionalmente ao ar admitido, de forma a manter o enriquecimento φ da mistura constante.

Equação de estado dos gases ideais

A pressão dos gases no interior do cilindro é determinada por seu volume, temperatura e massa, de acordo com a equação de estado dos gases ideais.

Esta equação estabelece uma relação entre os parâmetros geométricos e os termodinâmicos.

Em base molar,

$$p V = n R T \quad (12)$$

A variação de massa no interior do cilindro se deve à entrada ou saída de massa pelas válvulas abertas, e sua diferencial total estabelece uma relação entre as variações de volume, pressão, massa e temperatura no interior do cilindro.

$$p dV + V dp = R T dn + n R dT \quad (13)$$

A massa dos gases contidos no cilindro varia quando as válvulas de admissão ou de escapamento estiverem abertas, e é igual ao somatório dos fluxos de massa através delas.

Primeira Lei da Termodinâmica

A conservação da energia no interior do cilindro é descrita pela Primeira Lei da Termodinâmica para sistemas abertos.

Em base mássica,

$$dU = dQ - p dV + h_i dm_i - h_e dm_e \quad (14)$$

Vazão mássica nas válvulas

O escoamento da massa através das válvulas é descrito pela equação do fluxo isentrópico e compressível através de uma restrição, corrigida por um coeficiente de descarga experimental.

Esta equação algébrica determina o fluxo de massa através das válvulas em função de sua área de passagem, do diferencial de pressão através delas, e das propriedades termodinâmicas p_o , p , R , T_o , k do fluido que as atravessa.

A área de passagem A_t é definida como o produto da circunferência da tulipa da válvula por sua abertura, e o fluxo de massa é calculado pela expansão isentrópica de um fluido compressível através desta área, corrigida por um coeficiente de descarga determinado experimentalmente.

O coeficiente de descarga C_d é função de L/D , onde L (do inglês, *lift*) é a abertura, e D o diâmetro da válvula (Heywood, 1989; Annand, 1974).

$$\frac{dm}{dt} = \frac{C_d A_t p_o}{\sqrt{R T_o}} \left(\frac{p_t}{p_o} \right)^{\frac{1}{k}} \sqrt{\frac{2k}{k-1}} \sqrt{1 - \left(\frac{p_t}{p_o} \right)^{\frac{k-1}{k}}} \quad (15)$$

onde

- C_d é o coeficiente de descarga experimental, adimensional
- A_t é a área da restrição, m^2
- p_o é a pressão de estagnação a montante da restrição, Pa
- p_t é a pressão na garganta do escoamento, Pa
- R é a constante gasosa do fluido escoando através da válvula
- T_o é a temperatura de estagnação do fluido a montante da restrição, K
- k é o coeficiente isentrópico do fluido

Conforme o sentido do escoamento, a garganta pode estar no interior do cilindro ou no coletor, assim como o ponto de estagnação pode estar no coletor ou no interior do cilindro. As propriedades termodinâmicas R , k do fluido são avaliadas no ponto de estagnação.

O sinal de dm/dt é positivo quando os gases estão entrando no cilindro, e negativo quando estão saindo do cilindro.

Os fluxogramas das Figuras 12 e 13 explicam as rotinas de cálculo do escoamento através das válvulas.

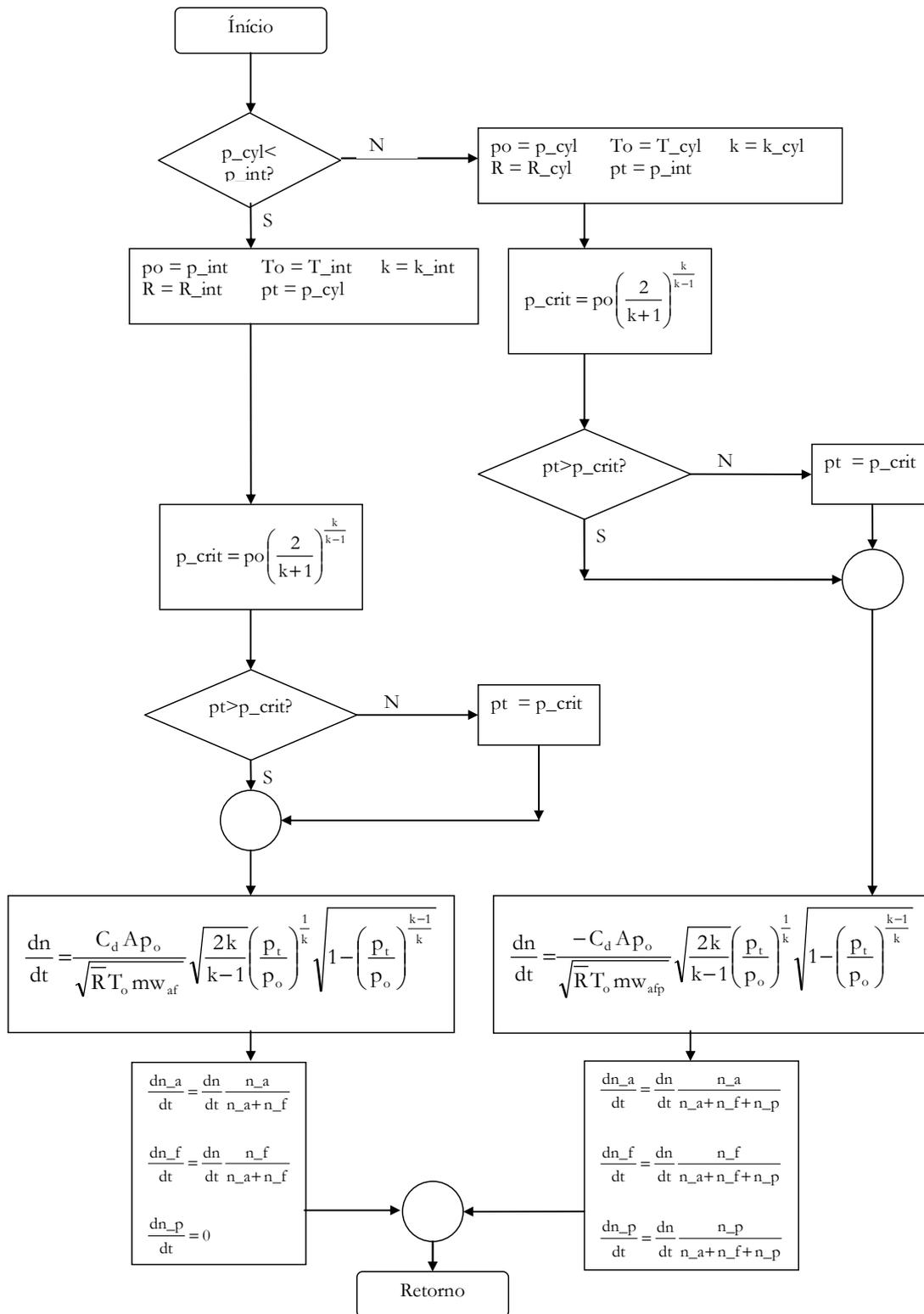


Figura 12: Fluxograma da rotina de cálculo do escoamento através da válvula de admissão.

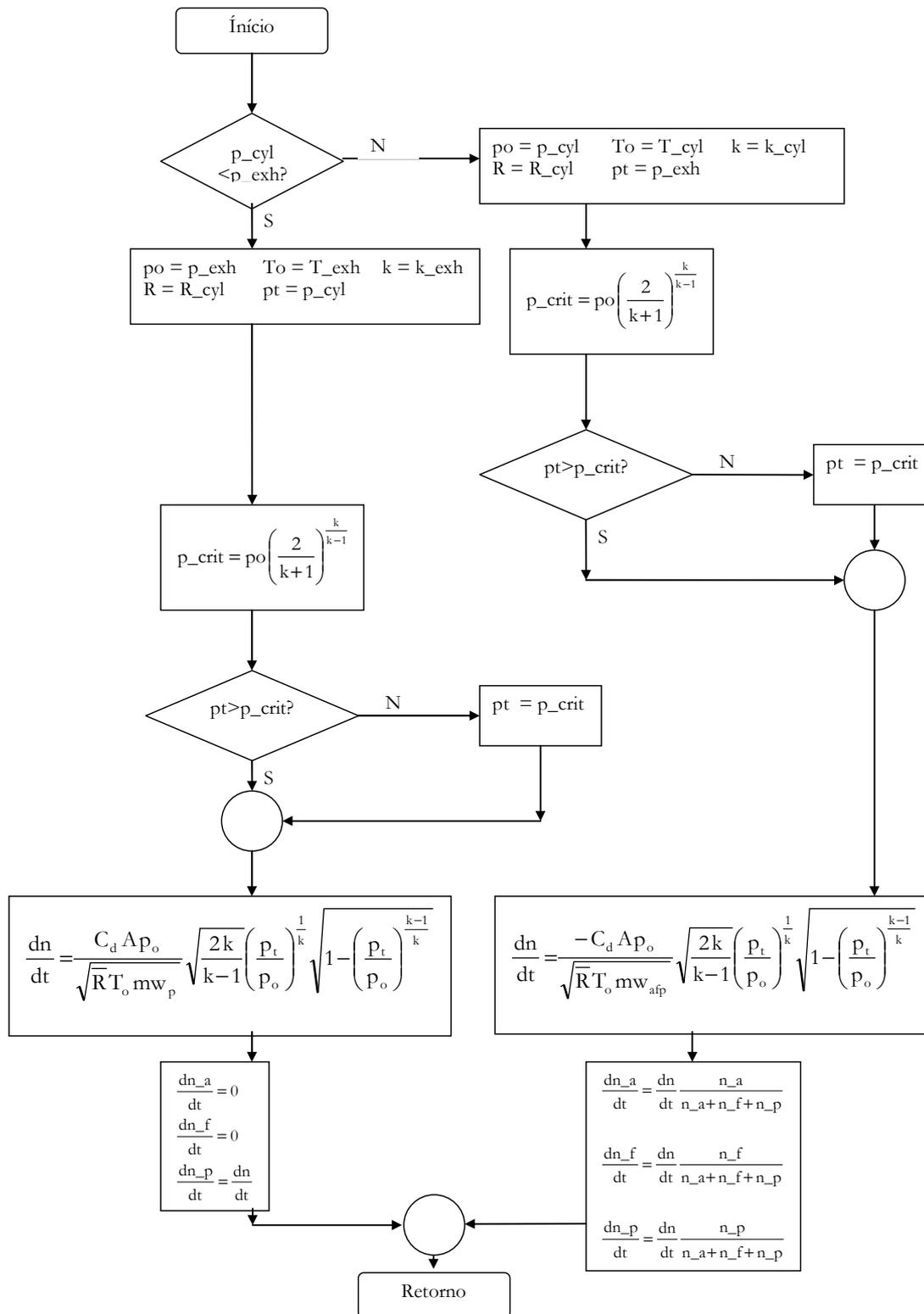


Figura 13: Fluxograma da rotina de cálculo do escoamento através da válvula de escapeamento.

2.3.3 Modelo de duas zonas de combustão

As zonas queimada e não queimada são definidas conforme as hipóteses de Annand, como dois sistemas termodinâmicos abertos que formam em conjunto um sistema termodinâmico fechado coincidente com o volume do cilindro, através dos limites do qual não flui massa ou entalpia.

Entre as duas zonas o fluxo de massa corresponde à taxa de queima, e a massa e entalpia que saem de uma são iguais às que entram na outra.

Ao cruzar os limites da zona queimada a massa de reagentes transforma-se instantaneamente em produtos da combustão, convertendo a diferença entre a energia das ligações químicas dos produtos e a dos reagentes em energia térmica. Esta diferença é igual à diferença entre a entalpia de formação dos reagentes e dos produtos da combustão.

Para determiná-la é necessário conhecer a composição dos gases de combustão, o que é feito admitindo-se a hipótese de equilíbrio termodinâmico destes, justificada pelo fato das reações químicas de combustão serem muito mais rápidas que o deslocamento da frente de chama.

A temperatura inicial da zona queimada é determinada igualando-se a entalpia dos produtos à dos reagentes ao final da compressão, e corresponde à temperatura adiabática de chama à pressão constante. A variação de temperatura dos produtos da combustão é determinada por um balanço de massa e energia, aplicando-se a Primeira Lei da Termodinâmica e a equação de estado dos gases ideais simultaneamente às zonas queimada e não queimada.

A diferencial total da equação de estado dos gases ideais e a Primeira Lei da Termodinâmica são aplicadas simultaneamente às zonas queimada e não queimada, resultando um sistema de quatro equações diferenciais e sete incógnitas (dT_u , dT_b , dV , df_b , dQ_u , dQ_b , dp) reduzido a seguir por manipulações algébricas a três equações e seis incógnitas (dT_u , dT_b , df_b , dQ_u , dQ_b , dp).

Os coeficientes destas equações são funções das propriedades geométricas do cilindro, das temperaturas T_u da zona não queimada e T_b da zona queimada, e das propriedades termodinâmicas dos gases contidos no cilindro.

Os valores de A , V , dV , são propriedades geométricas e cinemáticas, calculadas a partir das dimensões do cilindro e da velocidade angular do virabrequim e da cinemática do mecanismo formado pelo pistão, biela e manivela.

Os valores de T_b e T_u são obtidos por integração da equação diferencial a partir de suas condições iniciais.

Os valores das propriedades termodinâmicas h_u , u_u , cp_u , cv_u , mw_u da mistura de ar, combustível e gases residuais, são calculados pela rotina de propriedades da zona não queimada, cujos dados de entrada são suas frações molares e temperatura.

Os valores das propriedades termodinâmicas h_b , u_b , cp_b , cv_b , mw_b , $\partial mw_b / \partial p$, $\partial mw_b / \partial T$ dos gases de combustão são calculados pela rotina de propriedades da zona queimada, cujos

dados de entrada são composição química do combustível, enriquecimento da mistura de ar e combustível, pressão e temperatura da zona queimada.

O sistema de equações diferenciais é linear, e pode ser resolvido para encontrar a taxa de combustão df_b/dt e as derivadas de temperatura dT_b/dt e dT_u/dt em função de dp/dt , dQ_b/dt , dQ_u/dt , dV/dt : Este é o modelo de diagnose, que determina a evolução da fração de massa queimada em função da curva de pressão obtida experimentalmente.

O sistema também pode ser resolvido para encontrar dp/dt , dT_b/dt , dT_u/dt em função de df_b/dt , dQ_b/dt , dQ_u/dt , dV/dt : Este é o modelo de predição, que determina a curva de pressão em função da fração de massa queimada, modelada pela função de Wiebe.

Nos dois casos, para resolver o sistema é necessário um modelo que descreva a troca de calor entre os gases e as paredes do cilindro, e sua distribuição entre as zonas queimada e não queimada. Neste trabalho, serão utilizadas a Correlação de Woschni e o modelo da Cummins (Stiesch, 2006).

A seqüência de desenvolvimento do modelo de escapamento, admissão e compressão encontra-se no Anexo A, enquanto que a seqüência de desenvolvimento do modelo de duas zonas de combustão encontra-se no Anexo B.

Considerações de conservação de energia, conservação de massa e geometria do cilindro

A conservação da energia num volume de controle é representada pela Primeira Lei da Termodinâmica, enquanto a conservação de massa é representada pela equação de estado dos gases ideais (Stiesch, 2006).

Para simular os processos de combustão, o motor é separado em componentes simples ou sistemas parciais, que podem ser vistos como sistemas termodinâmicos fechados ou abertos. Para efetuar o balanço destes sistemas, usa-se o balanço de massa (equação de continuidade):

$$\frac{dm}{dt} = \sum \dot{m}_e - \sum \dot{m}_s \quad (16)$$

e o balanço de energia (Primeira Lei da Termodinâmica) para sistemas abertos

$$\frac{dU}{dt} = \frac{dQ}{dt} - \frac{dW}{dt} + \sum \dot{m}_e \left(h_e - \frac{1}{2} w_e^2 \right) \quad (17)$$

ou, para sistemas fechados:

$$\frac{dU}{dt} = \dot{Q} - \dot{W} \quad (18)$$

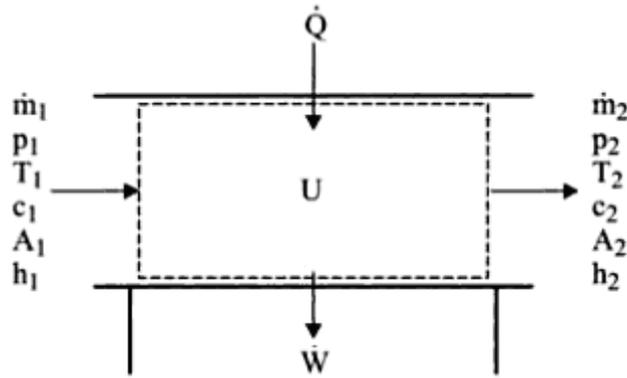


Figura 14: Sistema termodinâmico aberto (Stiesch, 2006)

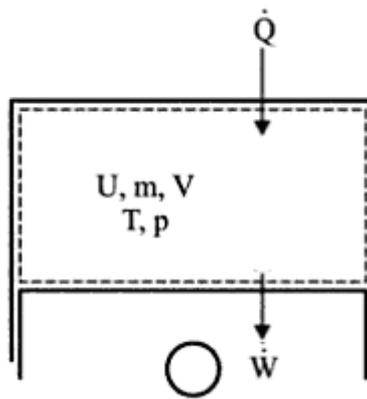


Figura 15: Sistema termodinâmico fechado (Stiesch, 2006)

Nenhuma massa, e com isto nenhuma entalpia, flui através dos limites dos sistemas fechados.

Desprezando-se as perdas por vazamentos (em inglês, *blowby*), o cilindro pode ser visto como um sistema fechado durante os processos de compressão e expansão, enquanto as válvulas de admissão e escapamento estiverem fechadas.

Por outro lado, massas podem fluir através das fronteiras de um sistema aberto, como um recipiente ou tubulação.

Desprezando o atrito ou a dissipação de trabalho mecânico em calor, obtém-se a seguinte equação para o trabalho realizado pelos gases no interior do cilindro

$$\frac{dW}{dt} = p \frac{dV}{dt} \quad (19)$$

No caso de um sistema aberto a energia interna transferida através das fronteiras do sistema e o trabalho de bombeamento formam a entalpia das correntes de entrada ou saída de massa:

$$h = u + p v \quad (20)$$

Descrição do modelo

A Figura 16 apresenta o corte transversal do motor, mostrando os volumes de controle que contêm as duas zonas que dividem o interior do cilindro durante a combustão.

O volume do cilindro é dividido em duas zonas: queimada e não-queimada. No interior da zona queimada, a composição dos gases de combustão é variável e as espécies químicas que os compõem estão em equilíbrio termodinâmico.

No interior da zona não queimada, a composição da mistura fresca é fixa. Esta é composta por ar, vapor de combustível e produtos da combustão do ciclo anterior.

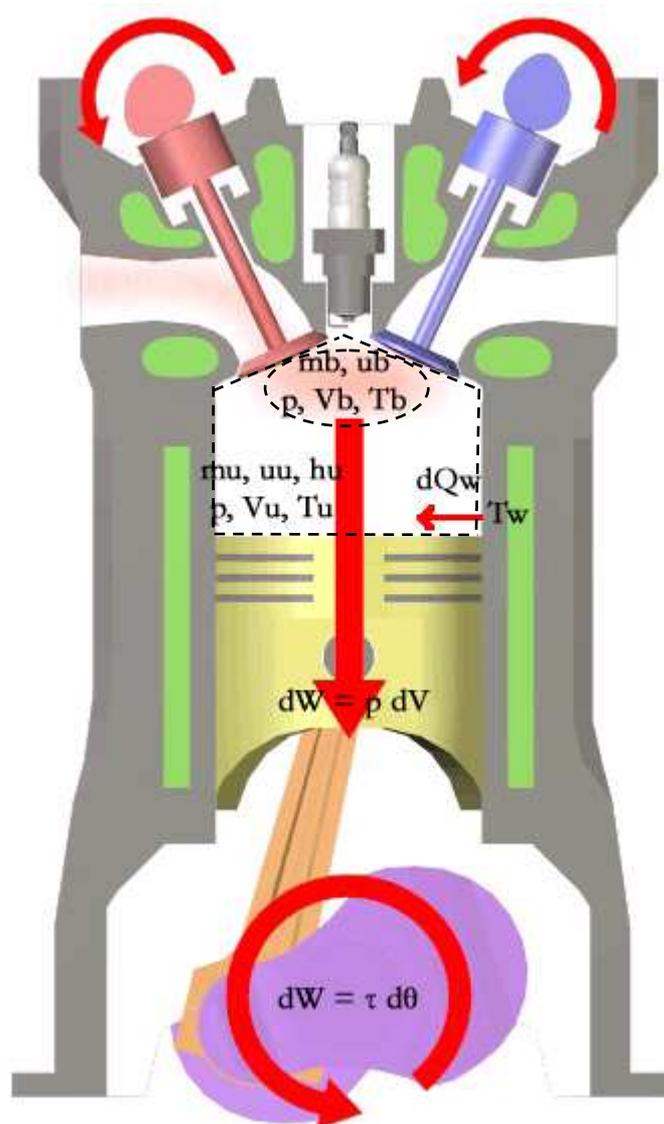


Figura 16: Volumes de controle durante o processo de combustão. Os sufixos b, u, w referem-se às zonas queimada (*burned*), não queimada (*unburned*) e à parede (*wall*) do cilindro.

dm_b/dt é o fluxo de massa saindo da zona não queimada e entrando na zona queimada.

Por definição, a expansão da zona queimada se dá por incorporação do volume ocupado pela zona não queimada, de modo que

$$dm_b/dt = \rho_u dV_b \quad (21)$$

$$dm_b/dt = S_t A_{fl} \rho_u \quad (22)$$

onde

S_t é a velocidade turbulenta de chama

A_{fl} é a área da frente livre de chama

ρ_u é a densidade da mistura de ar e combustível contida na zona não queimada

A partir de considerações de conservação de massa,

$$dm_b = -dm_u \quad (23)$$

e de conservação de energia, representada pela Primeira Lei da Termodinâmica para volumes abertos,

$$dU = dQ - p dV + h_i dm_i - h_e dm_e \quad (24)$$

onde

dU = variação da energia interna do volume de controle

dQ = variação de calor entrando no volume de controle

dV = variação do volume de controle

h_i = entalpia da massa entrando no volume de controle

h_e = entalpia da massa saindo do volume de controle

sendo que

$$dU = d(m u) = m du + u dm = m cv dT + u dm \quad (25)$$

pode-se escrever, para a zona queimada

$$m cv_b dT_b + u_b dm_b = dQ_{w_b} - p dV_b + h_u dm_b = -p dV_b + h_u dm_b \quad (26)$$

e para a zona não queimada

$$m_u cv_u dT_u + u_u dm_u = dQ_{w_u} - p dV_u - h_u dm_b \quad (27)$$

A partir de considerações geométricas, pode-se escrever

$$V_u + V_b = V \quad (28)$$

e portanto

$$dV_u + dV_b = dV \quad (29)$$

De acordo com a hipótese de Annand, a pressão interna do cilindro é igual através de todo o seu volume, portanto

$$p_u = p_b = p \quad (30)$$

A aplicação da equação de estado dos gases ideais à zona queimada permite escrever

$$p V_b = m_b R_b T_b \quad (31)$$

e à zona não queimada,

$$p V_u = m_u R_u T_u \quad (32)$$

onde

$$R_u = \frac{\bar{R}}{n_a mw_a + n_f mw_f + n_p mw_p} \quad (33)$$

\bar{R} é a constante universal dos gases

n é o número de mols na zona não queimada

mw é a massa molecular

e os sufixos a, f, p referem-se ao ar, combustível e produtos da combustão, respectivamente.

$$R_b = \frac{\bar{R}}{\sum_{i=1}^{12} x_i mw_i} \quad (34)$$

onde

x_i é a fração molar da i -ésima espécie em equilíbrio termodinâmico, presente nos gases de combustão contidos na zona queimada.

Os valores das frações molares são determinados a partir da hipótese de equilíbrio termodinâmico e do balanço da reação de combustão, conhecidas a fórmula empírica do combustível, a composição do ar atmosférico e o enriquecimento da mistura de ar e combustível na admissão.

Por definição, as espécies estão em equilíbrio termodinâmico quando o diferencial da função de Gibbs dos gases de combustão presentes na zona queimada é igual a zero, ou seja,

$$dG = 0 \quad (35)$$

Por definição, a função de Gibbs de uma substância é

$$G = h - T s \quad (36)$$

e a de uma mistura,

$$G = \sum_{i=1}^n x_i (h_i - T s_i) \quad (37)$$

Portanto, em condições de equilíbrio termodinâmico, as frações molares das espécies presentes na mistura são tais que

$$dG_b = d\left(\sum_{i=1}^n x_i (h_i - T_b s_i)\right) = 0 \quad (38)$$

À temperatura T_b constante,

$$dG_b = \sum_{i=1}^n (h_i - T_b s_i) dx_i = 0 \quad (38.a)$$

$$dG_b = \sum_{i=1}^n G_i dx_i = 0 \quad (38.b)$$

onde

h_i é a entalpia da i -ésima espécie gasosa, avaliada à temperatura T_b .
 s_i é a entalpia da i -ésima espécie gasosa, avaliada à temperatura T_b .

Desta igualdade resulta um sistema de equações cuja solução é o vetor \mathbf{x}_b , cujos elementos são as frações molares das espécies químicas presentes nos gases de combustão em equilíbrio termodinâmico.

A solução deste sistema é efetuada pela rotina PROPTERMEQ, a partir das constantes de equilíbrio das reações de combustão.

2.4 Descrição dos modelos de simulação

2.4.1 Modelo preditivo

O modelo preditivo calcula as derivadas da pressão no interior do cilindro, temperatura e frações molares dos gases de combustão contidos na zona queimada; em função de parâmetros geométricos, cinemáticos e termodinâmicos, conforme o fluxograma da Figura 17.

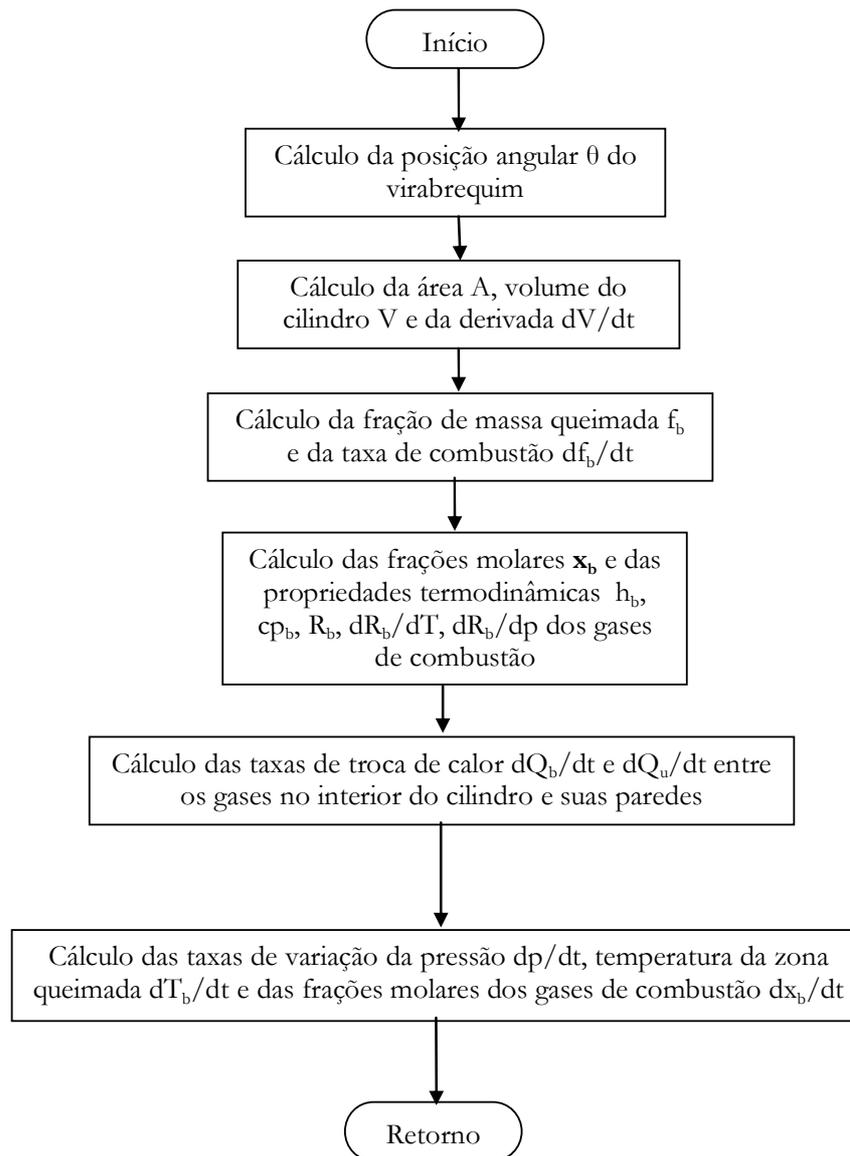


Figura 17: Fluxograma da rotina do modelo preditivo

Variáveis de entrada do modelo preditivo

- Tempo t ,
- Velocidade angular do virabrequim ω ,
- Pressão no interior do cilindro p ,
- Temperatura dos gases de combustão na zona queimada T_b ,
- Temperatura da mistura (ar, combustível e gases residuais) na zona não queimada T_u ,
- Composição molar dos gases de combustão na zona queimada \mathbf{x}_b ,
- Área das paredes A , volume V e taxa de variação do volume do cilindro dV/dt ,
- Fração de massa queimada f_b e taxa de queima df_b/dt ,
- Taxas de troca de calor entre os gases contidos no cilindro e as paredes, dQ_b/dt e dQ_u/dt

Condições iniciais do modelo preditivo

De acordo com Annand, considera-se a temperatura inicial dos gases de combustão na zona queimada igual à temperatura adiabática de chama à pressão constante, determinada a partir dos valores de pressão e temperatura da mistura não queimada ao final da compressão, quando ocorre a centelha. O volume inicial dos gases de combustão, da fração inicial de massa queimada e a taxa inicial de troca de calor entre a zona queimada e as paredes são iguais a zero (Benson, 1975).

A massa de gases aprisionados no interior do cilindro durante toda a combustão e a expansão é igual àquela existente no instante do fechamento das válvulas, ao final do processo de admissão.

Dados de saída do modelo preditivo

Os dados de saída do modelo preditivo são:

- A taxa de variação da pressão no interior do cilindro dp/dt ;
- A taxa de variação da temperatura dos gases de combustão na zona queimada dT_b/dt ;
- A taxa de variação da temperatura da mistura na zona não queimada dT_u/dt ;
- A taxa de variação das frações molares dos gases de combustão contidos na zona queimada $d\mathbf{x}_b/dt$.

Os dados de saída do modelo preditivo são integrados por um método numérico de solução de equações diferenciais, resultando:

- A pressão no interior do cilindro p ;
- As temperaturas T_b dos gases de combustão e T_u da mistura não queimada;
- As frações molares dos gases de combustão contidos na zona queimada \mathbf{x}_b .

A partir destes dados, o diagrama p V do ciclo Otto pode ser traçado.

2.4.2 Modelo de diagnose

Descrição do modelo

O modelo de diagnose calcula as taxas de variação da fração de massa queimada df_b/dt , da temperatura da mistura não queimada dT_u/dt , da temperatura dT_b/dt e das frações molares dx_b/dt dos gases de combustão contidos na zona queimada; em função da curva de pressão experimental e de parâmetros geométricos, cinemáticos e termodinâmicos, conforme o fluxograma da Figura 18.

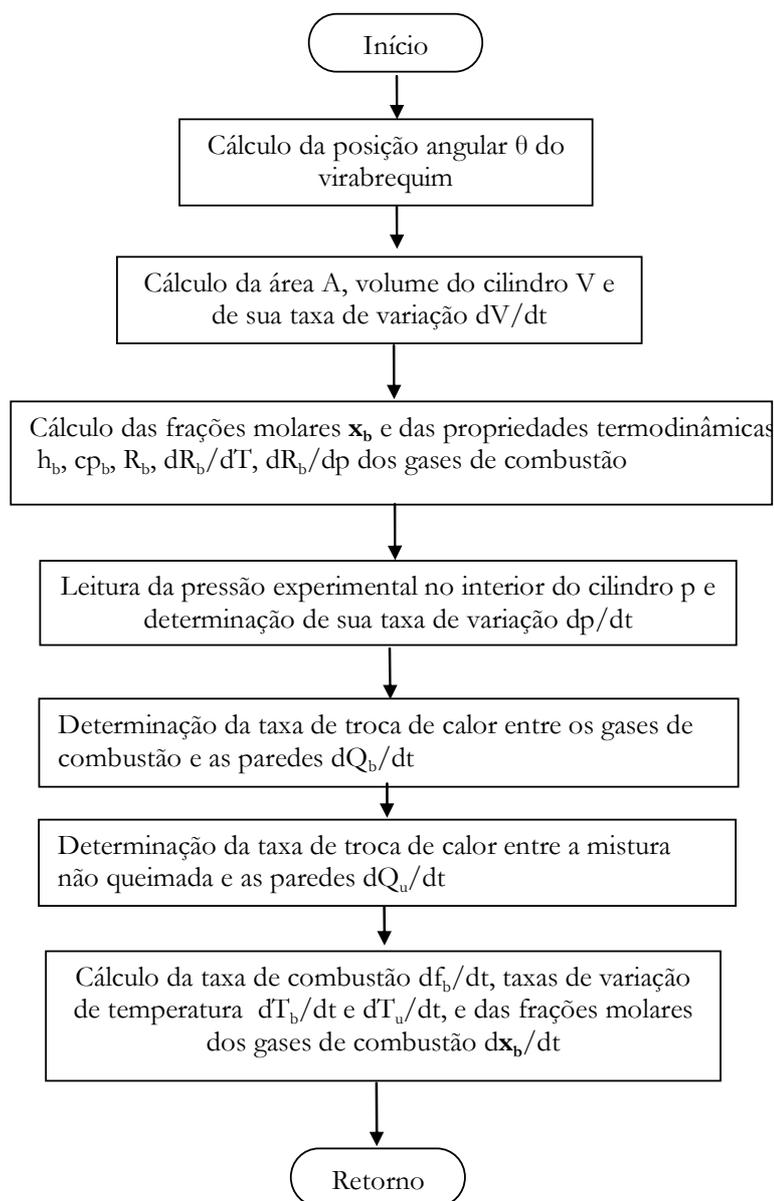


Figura 18: Fluxograma da rotina do modelo de diagnose

Variáveis de entrada do modelo de diagnose

- Tempo t ;
- Velocidade angular do virabrequim ω ;
- Curva experimental de pressão p no interior do cilindro e sua taxa de variação dp/dt ;
- Temperatura dos gases de combustão na zona queimada T_b ;
- Temperatura da mistura de ar, combustível e gases residuais na zona não queimada T_u ;
- Composição molar dos gases de combustão na zona queimada x_b ;
- Área das paredes A , volume V e taxa de variação do volume do cilindro dV/dt ;
- Taxas de troca de calor entre os gases contidos no cilindro e as paredes, dQ_b/dt e dQ_u/dt .

Condições iniciais do modelo de diagnose

São as mesmas do modelo preditivo.

De acordo com Annand, considera-se a temperatura inicial dos gases de combustão na zona queimada igual à temperatura adiabática de chama à pressão constante, determinada a partir dos valores de pressão e temperatura da mistura não queimada ao final da compressão, quando ocorre a centelha. O volume inicial dos gases de combustão, da fração inicial de massa queimada e a taxa inicial de troca de calor entre a zona queimada e as paredes são iguais a zero (Benson, 1975).

A massa de gases aprisionados no interior do cilindro durante toda a combustão e a expansão é igual àquela existente no instante do fechamento das válvulas, ao final do processo de admissão.

Dados de saída do modelo de diagnose

Os dados de saída do modelo de diagnose são:

- A taxa de combustão df_b/dt ;
- A taxa de variação da temperatura na zona queimada dT_b/dt ;
- A taxa de variação da temperatura na zona não queimada dT_u/dt ;
- A taxa de variação das frações molares dos gases de combustão na zona queimada dx_b/dt .

Os dados de saída do modelo de diagnose são integrados por um método numérico de solução de equações diferenciais, permitindo obter:

- A fração de massa queimada f_b ;
- As temperaturas dos gases de combustão T_b e da mistura não queimada T_u ;
- As frações molares dos gases de combustão contidos na zona queimada x_b .

A partir destes dados, o volume do cilindro pode ser calculado pela equação de estado, e comparado com o volume determinado pela geometria do cilindro.

2.5 Descrição das rotinas

Os coeficientes das equações diferenciais que compõem os modelos são funções de parâmetros geométricos e cinemáticos do mecanismo biela-manivela e do cilindro, e termodinâmicos dos gases nele contidos. Para sua determinação são necessárias as rotinas

FRAC_MOL_AR, cálculo das frações molares das espécies químicas contidas no ar atmosférico em função de sua temperatura e umidade relativa

PROPTERMU, determina as propriedades termodinâmicas h , u da mistura de gases de composição fixa contidos na zona não queimada, em função de suas frações molares e temperatura;

PROPTERMF, determina as propriedades termodinâmicas h , u do combustível na fase gasosa contido na zona não queimada, em função de sua temperatura;

PROPTERMEQ, cálculo das propriedades termodinâmicas h , u , das frações molares x e de suas derivadas parciais em relação à temperatura e pressão dos gases de combustão em equilíbrio termodinâmico contidos na zona queimada, em função de sua pressão, temperatura, enriquecimento da mistura e composição química do combustível cuja queima os gerou.

VALVELIFT, determina a abertura das válvulas de admissão e escapamento, em função da posição angular do eixo de comando de válvulas.

WOSCHNI, determina o coeficiente de transferência de calor por convecção entre as paredes e os gases no interior do cilindro, em função de parâmetros geométricos, cinemáticos e termodinâmicos.

T_BO, determina a temperatura inicial dos gases de combustão, em função da fórmula empírica do combustível, enriquecimento da mistura, pressão e temperatura no cilindro no instante final da compressão.

Para os processos de escapamento, admissão e compressão; são necessárias as rotinas FRAC_MOL_AR, PROPTERMU, PROPTERMF, VALVELIFT, WOSCHNI.

Para o modelo de duas zonas são necessárias as rotinas FRAC_MOL_AR, PROPTERMU, PROPTERMEQ, TBO, WOSCHNI.

O fluxograma da Figura 19 mostra a seqüência de acesso às rotinas, no modelo preditivo.

O fluxograma da Figura 20 mostra a seqüência de acesso às rotinas, no modelo de diagnose.

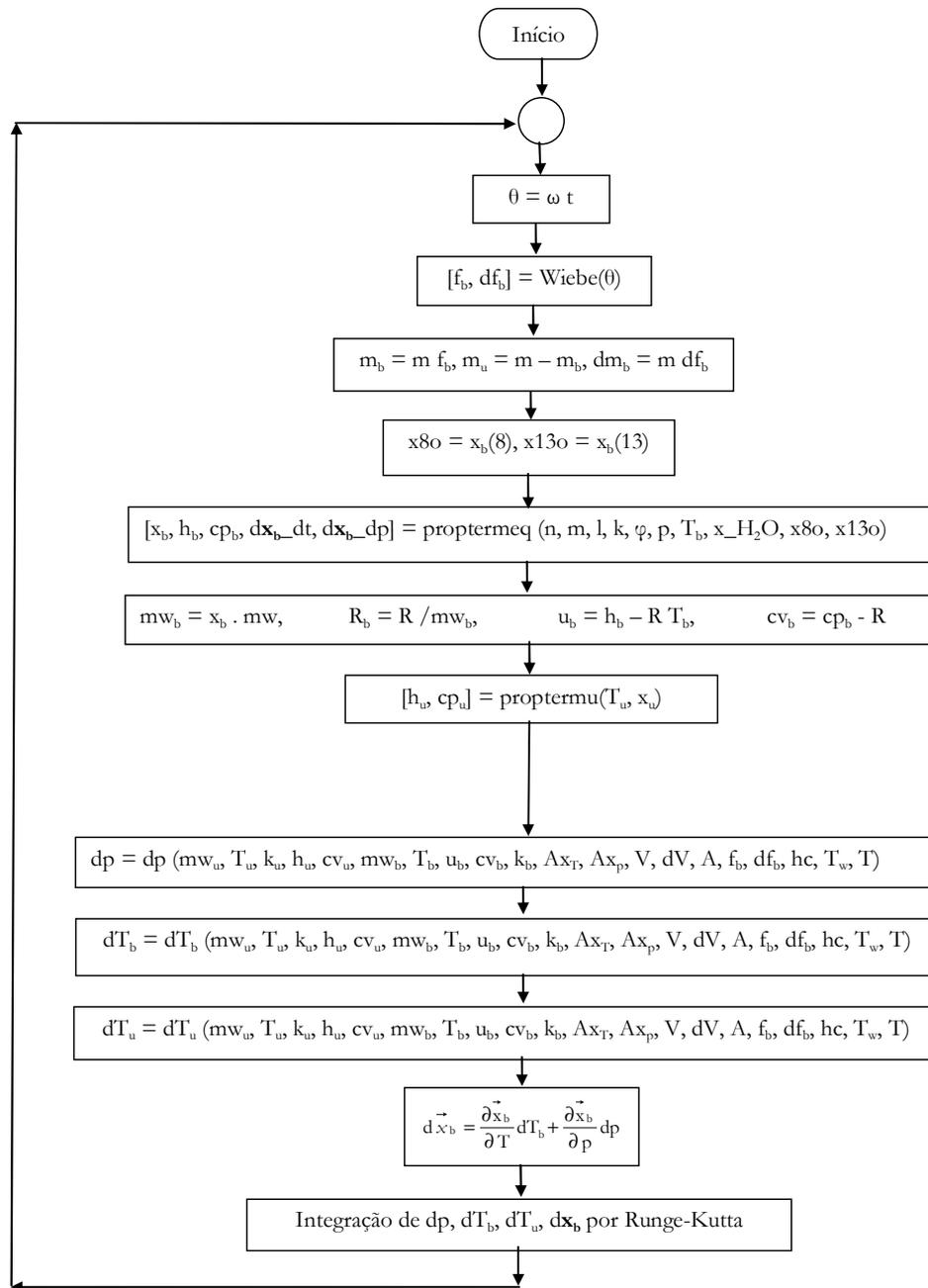


Figura 19: Fluxograma da seqüência de acesso às rotinas pelo modelo preditivo

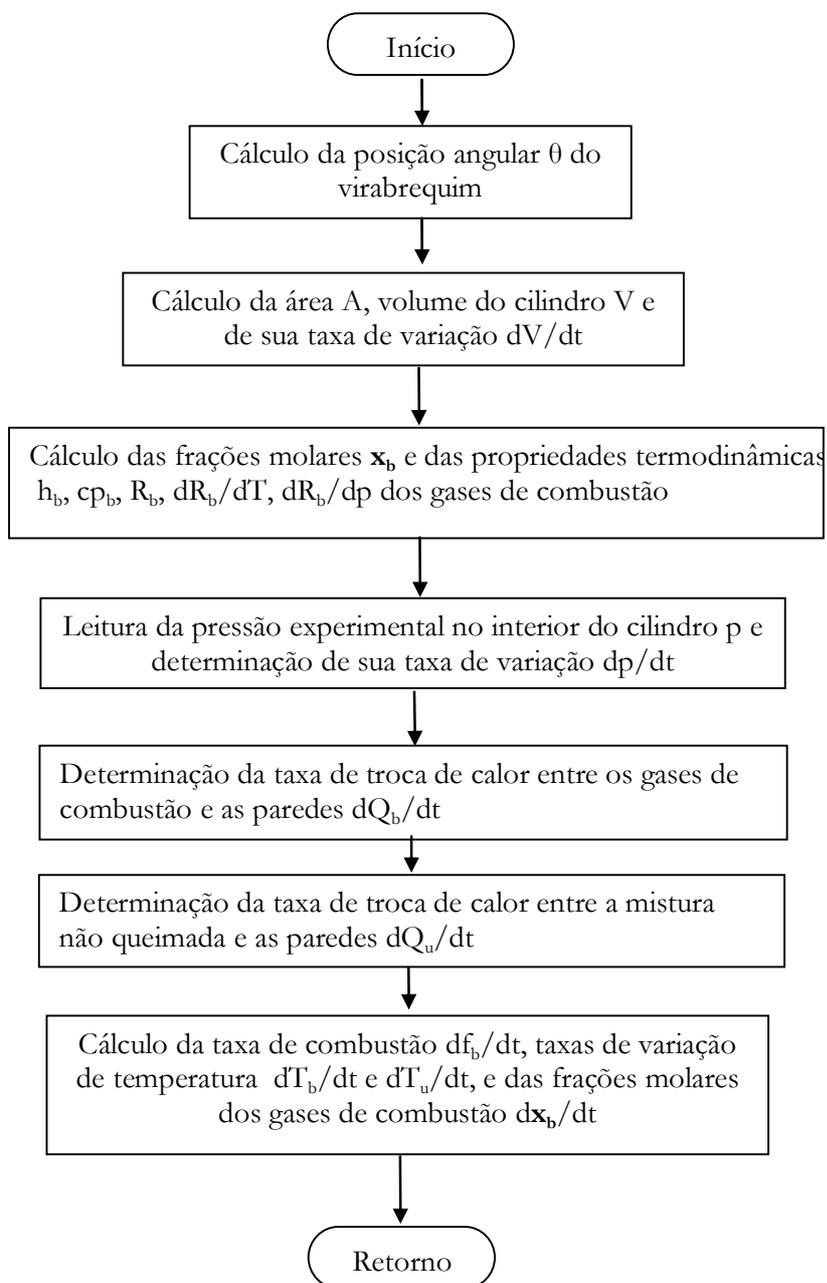


Figura 20: Fluxograma da seqüência de acesso às rotinas pelo modelo de diagnose.

2.5.1 Determinação das frações molares do ar atmosférico

As frações molares dos gases presentes no ar atmosférico são determinadas pela rotina FRAC_MOL_AR, em função de sua temperatura e umidade relativa. A pressão de vapor de H₂O à temperatura do ar é determinada pela Lei de Antoine, e então sua fração molar de H₂O é determinada a partir da umidade relativa.

2.5.2 Determinação das frações molares da mistura de ar, combustível e gases residuais

Por hipótese, os gases de combustão de são uma mistura de 12 espécies químicas em equilíbrio termodinâmico (Velásquez, 1993), a que se atribui os seguintes índices:

1. H
2. O
3. N
4. H₂
5. OH
6. CO
7. NO
8. O₂
9. H₂O
10. CO₂
11. N₂
12. Ar

No início da combustão do primeiro ciclo o cilindro encontra-se cheio de ar e combustível; a partir do segundo ciclo existem gases residuais ao final do processo de escapamento, e o ar atmosférico mistura-se aos gases residuais durante o processo de admissão.

As espécies químicas de 8 a 12 estão presentes no ar atmosférico e nos gases residuais; as de 1 a 7 apenas nos gases residuais, mas os átomos que as compõem também estão presentes no combustível.

Para efeitos de cálculo das propriedades termodinâmicas dos gases de combustão, as espécies de 1 a 7 misturam-se ao combustível, alterando os valores de n, m, l, k, hf, cpf; as espécies de 8 a 12 misturam-se ao ar, alterando os valores de alfa, beta, gama, delta que representam, respectivamente, a razão entre o número de mols de nitrogênio, dióxido de carbono, água, e argônio e o número de mols de oxigênio no ar presente na zona não queimada, no interior do cilindro.

n, m, l, k representam, respectivamente, o número de átomos de Carbono, Hidrogênio, Oxigênio e Nitrogênio na fórmula empírica do combustível.

A partir do segundo ciclo, os valores de α , β , γ , δ são

$$\alpha = x_{N_2} / x_{O_2} = x(11) / x(8) = n(11) / n(8) \quad (39)$$

$$\beta = x_{CO_2} / x_{O_2} = x(10) / x(8) = n(10) / n(8) \quad (40)$$

$$\gamma = x_{H_2O} / x_{O_2} = x(9) / x(8) = n(9) / n(8) \quad (41)$$

$$\delta = x_{Ar} / x_{O_2} = x(12) / x(8) = n(12) / n(8) \quad (42)$$

$$\alpha = \frac{na \, xa(11) + np \, xp(11)}{na \, xa(8) + np \, xp(8)} \quad (43)$$

$$\beta = \frac{na \, xa(10) + np \, xp(10)}{na \, xa(8) + np \, xp(8)} \quad (44)$$

$$\gamma = \frac{na \, xa(9) + np \, xp(9)}{na \, xa(8) + np \, xp(8)} \quad (45)$$

$$\delta = \frac{na \, xa(12) + np \, xp(12)}{na \, xa(8) + np \, xp(8)} \quad (46)$$

A partir do segundo ciclo, os valores de m, n, l, k são

$$n = \frac{nf \, n + np \, xp(6)}{nf + np \, xp(6)} \quad (47)$$

$$m = \frac{nf \, m + np \, (xp(1) + 2 \, xp(4) + xp(5))}{nf + np \, (xp(1) + 2 \, xp(4) + xp(5))} \quad (48)$$

$$l = \frac{nf \, l + np \, (xp(2) + xp(5) + xp(6) + xp(7))}{nf + np \, (xp(2) + xp(5) + xp(6) + xp(7))} \quad (49)$$

$$k = \frac{nf \, k + np \, (xp(3) + xp(7))}{nf + np \, (xp(3) + xp(7))} \quad (50)$$

A partir do segundo ciclo, as propriedades termodinâmicas do combustível passam a ser determinadas pela composição da mistura do combustível injetado no coletor de admissão com as espécies gasosas de 1 a 7 presentes nos gases residuais.

$$hf = \frac{nf \, hf + np \, (xp(1)hp(1) + xp(2)hp(2) + xp(3)hp(3) + xp(4)hp(4) + xp(5)hp(5) + xp(6)hp(6) + xp(7)hp(7))}{nf + np \, (xp(1)hp(1) + xp(2)hp(2) + xp(3)hp(3) + xp(4)hp(4) + xp(5)hp(5) + xp(6)hp(6) + xp(7)hp(7))} \quad (51)$$

$$hf = \frac{nf \, hf + np \, \sum_{i=1}^7 xp(i) \, hp(i)}{nf + np \, \sum_{i=1}^7 xp(i)} \quad (52)$$

$$cpf = \frac{nf\,cpf + np \sum_{i=1}^7 xp(i)\,cpp(i)}{nf + np \sum_{i=1}^7 xp(i)} \quad (53)$$

2.5.3 Determinação de parâmetros geométricos

A área das paredes do cilindro A , o volume V e o diferencial de volume dV são determinados em função das posições angulares do virabrequim e do eixo de comando de válvulas, de parâmetros geométricos do motor, e da velocidade angular ω do virabrequim; conforme descrito no Anexo E.

2.5.4 Determinação da abertura das válvulas

A Figura 21 mostra o diagrama polar de abertura das válvulas, definida como o levantamento da tulipa em relação à sede, em mm.

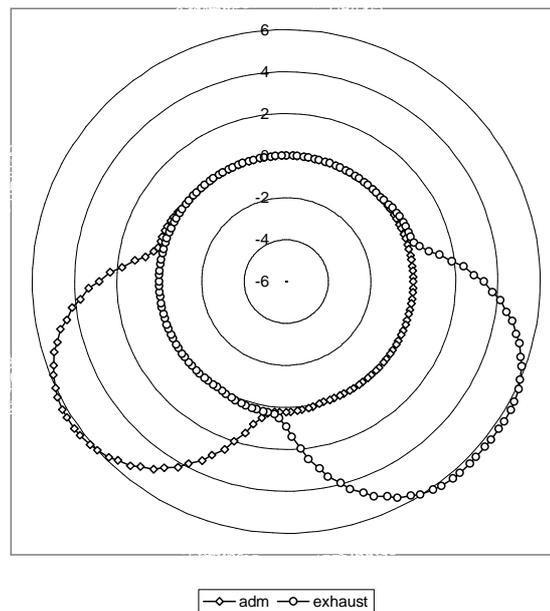


Figura 21: Diagrama polar de abertura das válvulas

A abertura das válvulas é determinada em função da posição angular do eixo de comando de válvulas θ_{cam} , pela função VALVELIFT, que é uma série de Fourier cujos coeficientes foram ajustados aos dados experimentais (veja a Seção 4.3 para conhecer o procedimento experimental utilizado).

Para tanto a abertura das válvulas de admissão e escapamento foram consideradas ser bem representadas pelas seguintes expressões,

$$h_{adm} = A_{adm_o} + \sum_{i=1}^{20} A_{adm_i} \cos(i\theta_i) + B_{adm_i} \sin(i\theta_i) \quad (54)$$

$$h_{exh} = A_{exh_o} + \sum_{i=1}^{20} A_{exh_i} \cos(i\theta_i) + B_{exh_i} \sin(i\theta_i) \quad (55)$$

onde

h_{adm} é a abertura (*lift*) da válvula de admissão, mm;

h_{exh} é a abertura (*lift*) da válvula de escapamento, mm;

Ao_{adm} é o valor médio da abertura da válvula de admissão e escapamento, mm;

Ao_{exh} é o valor médio da abertura da válvula de admissão e escapamento, mm.

Para determinar a abertura da válvula deve-se compensar a folga entre o came e os tuchos das válvulas, deduzindo 0,26 mm do valor da função que representa o perfil do came.

A Tabela 1 mostra os coeficientes das séries de Fourier que representam a abertura das válvulas de admissão e escapamento, calculados pelo ajuste dos 20 primeiros termos de uma série de Fourier aos dados experimentais. A determinação dos coeficientes da série de Fourier foi feito a partir da integração numérica da definição de seus termos, pela regra de Simpson, resultando $Ao_{adm} = 1,098611111$ e $Ao_{exh} = 1,372777778$.

Tabela 1: Coeficientes da série de Fourier que representa a abertura das válvulas.

i	Ai_adm	Bi_adm	Ai_exh	Bi_exh
1	-1,1419	-1,6836	-1,5605	1,9122
2	-0,5955	1,4912	-0,3537	-1,7302
3	1,0340	-0,2226	0,8306	0,4383
4	-0,3892	-0,3813	-0,2496	0,0982
5	-0,0385	0,1616	-0,0207	0,1163
6	-0,0438	0,0332	-0,1448	-0,1892
7	0,1216	0,0630	0,1869	0,0112
8	-0,0107	-0,1238	-0,0509	0,0445
9	-0,0484	0,0359	0,0150	0,0344
10	-0,0124	0,0000	-0,0642	-0,0310
11	0,0195	0,0525	0,0341	-0,0129
12	0,0341	-0,0446	0,0037	-0,0217
13	-0,0236	-0,0030	0,0307	0,0419
14	-0,0092	-0,0100	-0,0377	-0,0031
15	-0,0109	0,0294	0,0036	-0,0013
16	0,0249	-0,0052	-0,0053	-0,0184
17	-0,0045	-0,0057	0,0168	0,0072
18	0,0002	-0,0084	-0,0038	0,0020
19	-0,0123	0,0063	-0,0013	0,0079
20	0,0089	0,0057	-0,0073	-0,0093

Na rotina VALVELIFT a folga de 0,26 mm entre o came e o tucho é representada pela função max do *Matlab*, que retorna o maior valor entre a diferença entre o valor da abertura e a folga, e zero.

$$h_adm = \max(h_adm - 0.26, 0)$$

$$h_exh = \max(h_exh - 0.26, 0)$$

Nas Figuras 22 e 23, os marcadores circulares representam os dados experimentais e a linha sólida, a série de Fourier.

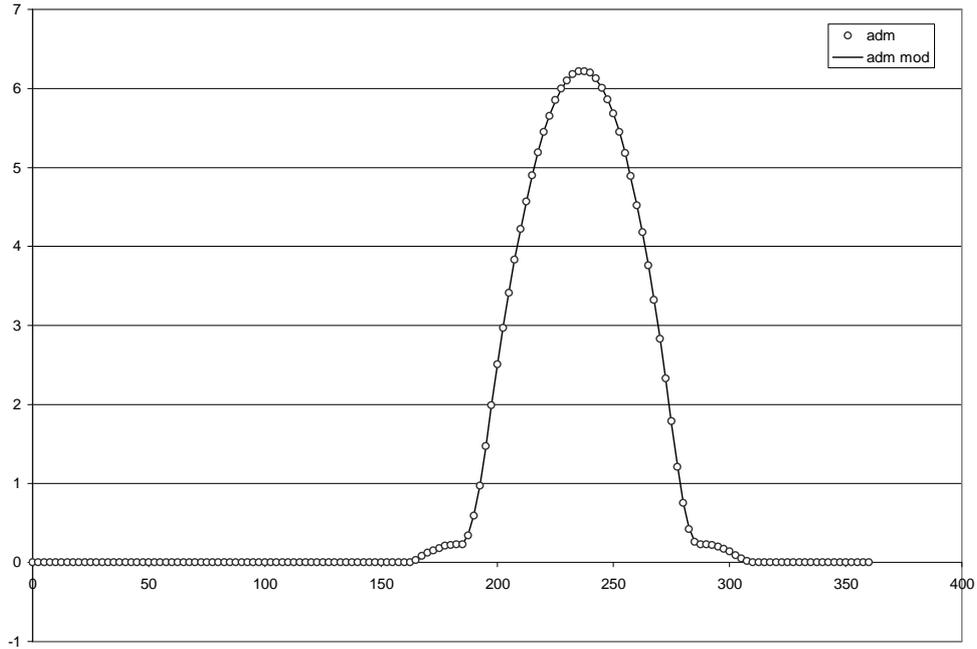


Figura 22: Perfil de abertura da válvula de admissão.

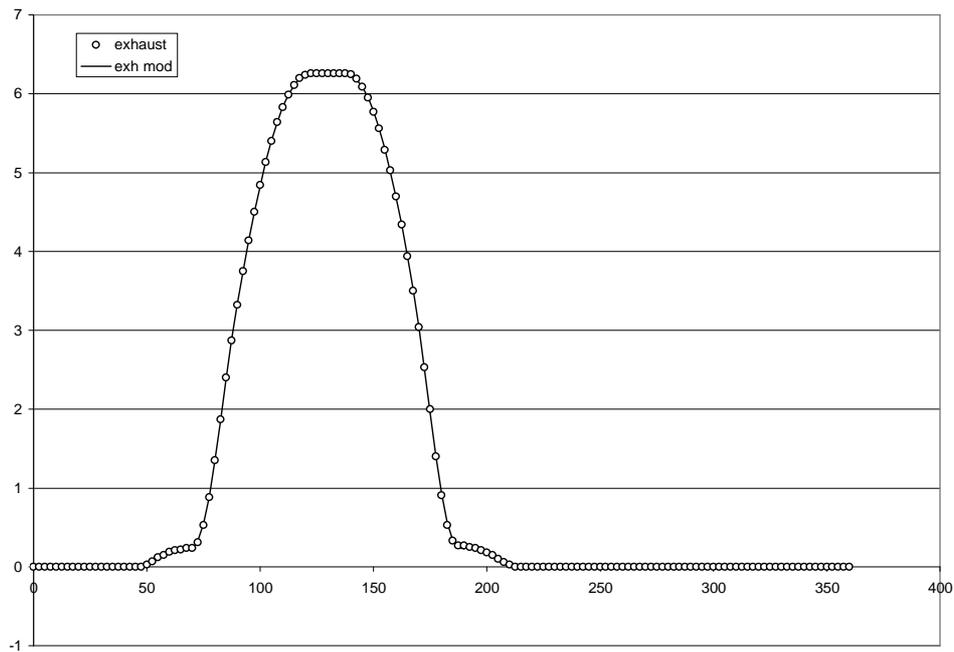


Figura 23: Perfil de abertura da válvula de escapamento

2.5.5 Determinação dos coeficientes de descarga das válvulas

Estes são determinados pelas funções CD_{INT} e CD_{EXH} , cujos coeficientes foram ajustados aos dados experimentais obtidos do ensaio do cabeçote do motor CFR montado em uma bancada de fluxo da *Superflow* (veja-se a Seção 4.3 para conhecer o procedimento experimental).

O coeficiente de descarga Cd_{int} da válvula de admissão foi determinado pela seguinte expressão:

$$Cd_{int} = e^{0,013266 h^2 - 0,173652 h - 0,621139} \quad (56)$$

A função que representa o coeficiente de descarga Cd_{exh} da válvula de escape é

$$Cd_{exh} = e^{0,002556 h^4 - 0,041872 h^3 + 0,245456 h^2 - 0,630295 h + 0,003285} \quad (57)$$

Na Figura 24 os marcadores representam os dados experimentais dos coeficientes de descarga, e as linhas sólidas as funções que os ajustam.

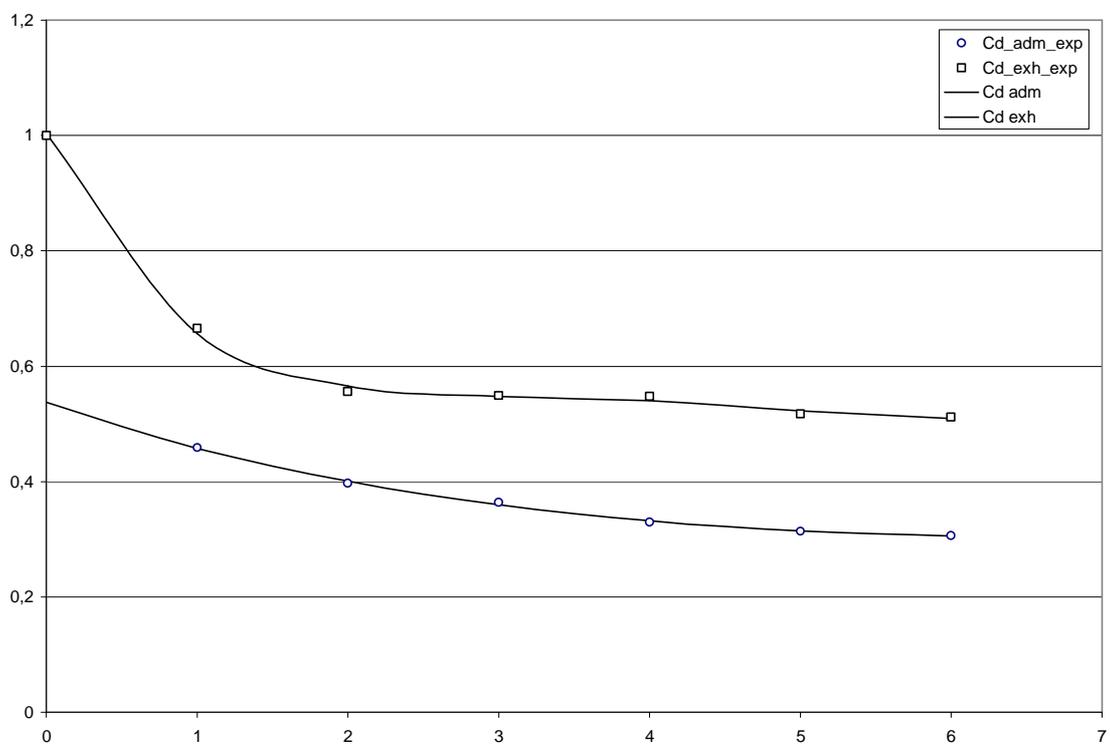


Figura 24: Ajuste dos dados experimentais do coeficiente de descarga das válvulas de admissão e de escape.

2.5.6 Determinação das propriedades termodinâmicas

Determinação das propriedades termodinâmicas dos gases contidos na zona não queimada

Os coeficientes das equações diferenciais que compõem os modelos são funções das propriedades termodinâmicas cp_u , cv_u , h_u , u_u , x_u , determinadas pela rotina PROPTERMU descrita no Anexo C.

A composição e as frações molares desta zona são fixas.

A entalpia h_u e o calor específico a pressão constante cp_u são determinados para cada uma das 12 espécies químicas constituintes do ar e dos gases residuais do ciclo anterior pela rotina proptermu, tendo como parâmetros a temperatura T_u da zona não queimada e as frações molares x_a e x_p do ar e dos gases residuais.

As frações molares do ar são determinadas pela rotina FRAC_MOL_AR, tendo como parâmetros a temperatura T_{int} do ar atmosférico e de sua umidade relativa ura , a partir da composição química média do ar seco e da equação de Antoine para a pressão de vapor da água.

As frações molares dos gases residuais são determinadas pela rotina proptermeq, a partir do equilíbrio termodinâmico dos gases de combustão vigente no instante da abertura da válvula de escapamento, ao final do processo de expansão anterior.

A rotina PROPTERMU baseia-se nos polinômios de Shomate, cujos coeficientes foram obtidos pela JANAF e publicados no *site* do NIST.

A entalpia h_f e o calor específico a pressão constante cp_f do vapor de combustível são determinados pela rotina proptermf, tendo como parâmetro a temperatura T_u da zona não queimada.

A rotina PROPTERMF baseia-se nos polinômios de Shomate, cujos coeficientes foram obtidos por regressão linear de dados experimentais publicados no *site* do NIST.

As energias internas u e os calores específicos a volume constante cv são determinados a partir de sua definição, pelas equações

$$u = h - R T \quad (58)$$

$$cv = cp - R \quad (59)$$

As propriedades da mistura de ar, combustível e gases residuais são determinados a partir do número de mols de ar, combustível e gases residuais presentes no interior do cilindro, de acordo com o modelo de mistura ideal.

$$h_u = \frac{n_a h_a + n_f h_f + n_p h_p}{n_a + n_f + n_p} \quad (60)$$

$$cp_u = \frac{n_a cp_a + n_f cp_f + n_p cp_p}{n_a + n_f + n_p} \quad (61)$$

$$u_u = \frac{n_a u_a + n_f u_f + n_p u_p}{n_a + n_f + n_p} \quad (62)$$

$$cv_u = \frac{n_a cv_a + n_f cv_f + n_p cv_p}{n_a + n_f + n_p} \quad (63)$$

Determinação das propriedades termodinâmicas e das frações molares dos gases de combustão contidos na zona queimada

A composição desta zona é variável, pois suas frações molares estão em equilíbrio termodinâmico (Benson, 1975). Os coeficientes das equações diferenciais são funções das propriedades termodinâmicas cv , u , h , cp , x , determinadas pela rotina PROPTERMEQ2B descrita no Anexo C, cuja sintaxe é

function[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq2b(n, m, l, k, fi, p, T, x_H2O, x8o, x13o)

Capítulo 3

Experimentos e Simulações

Para a validação do modelo termodinâmico computacional, é necessário obter resultados para o caso de acionamento elétrico externo e funcionamento normal do motor. Para ambos os casos são necessários levantar as curvas experimentais de pressão e volume relativo do cilindro em função do tempo a partir de condições iniciais e dados de entrada.

Para adquirir os dados experimentais, foi necessário instrumentar o motor CFR e instalar nele um sistema de controle e aquisição de dados. O tratamento dos dados experimentais de pressão obtidos com o sistema de instrumentação instalado em um banco de ensaios permite a obtenção da posição angular do virabrequim e a calibração do indicador de taxa de compressão do motor CFR. Devido à geometria do motor, também é necessário determinar os coeficientes de descarga das válvulas de admissão e escapamento.

Após o tratamento, os dados experimentais foram utilizados como dados de entrada ou de comparação com os dados de simulação obtidos por integração numérica das equações diferenciais que constituem os modelos termodinâmicos desenvolvidos neste trabalho, traduzidos em linguagem do programa Matlab e efetuada em microcomputador do tipo PC (Vide Figura 25).

3.1 Descrição das simulações

Um fluxograma representando a metodologia adotada para a interação entre a parte experimental e a utilização dos dados resultantes utilizados para a validação dos modelos termodinâmicos está representado na Figura 25. Segue a descrição dos procedimentos para a obtenção das curvas e apresenta a descrição do aparato experimental utilizado.

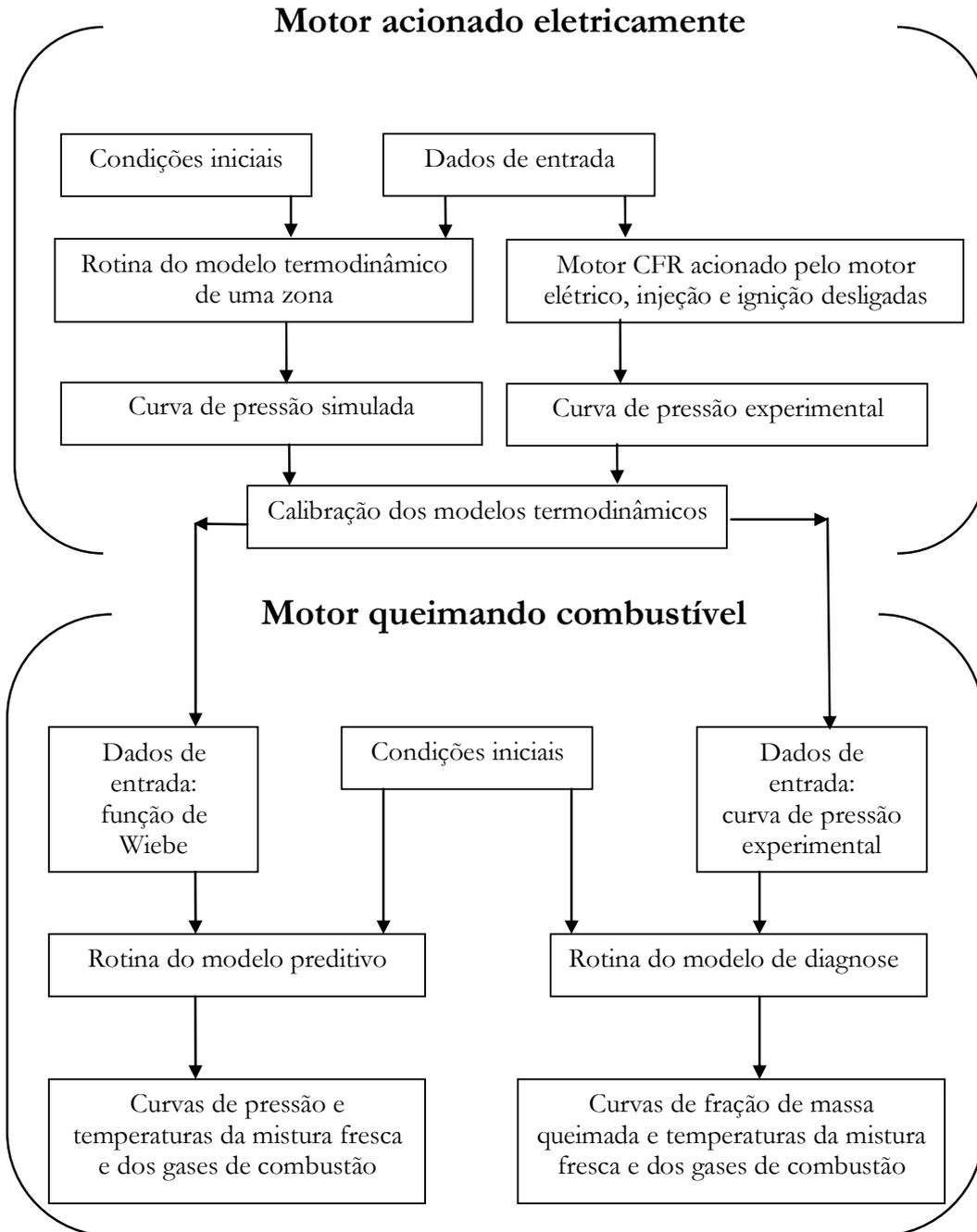


Figura 25: Fluxograma utilizado para a validação dos modelos termodinâmicos.

3.1.1 Motor acionado externamente

As taxas de variação de p e T_u determinadas pelo modelo termodinâmico foram integradas pelo método numérico de resolução de equações diferenciais de Runge-Kutta de 4ª ordem, resultando os valores desses parâmetros para o próximo passo de integração. Os passos foram repetidos tantas vezes quanto necessárias, varrendo todo o domínio de integração.

O modelo de escapamento, admissão e compressão determina as taxas de variação da pressão dp/dt e da temperatura dT_u/dt no interior do cilindro, e das vazões molares de ar dn_a/dt , combustível dn_f/dt e gases residuais dn_p/dt através das válvulas de admissão e escapamento.

As condições iniciais são arbitradas em algum ponto e simula-se o processo ao longo de vários ciclos até que um ciclo repita o anterior; o que ocorre em condições de regime permanente.

3.1.2 Motor queimando

As taxas de variação de p , T_b , T_u , f_b e x_b determinadas pelos modelos termodinâmicos foram integradas pelo método numérico de resolução de equações diferenciais de Runge-Kutta de 4ª ordem, resultando os valores desses parâmetros para o próximo passo de integração. Os passos são repetidos tantas vezes quanto necessárias, até varrer todo o domínio de integração.

O modelo de escapamento, admissão e compressão determina as taxas de variação da pressão dp/dt e da temperatura dT_u/dt no interior do cilindro, e das vazões molares de ar dn_a/dt , combustível dn_f/dt e gases residuais dn_p/dt através das válvulas de admissão e escapamento. Para manter a continuidade do modelo, admite-se que o diferencial de temperatura da zona queimada (dT_b) é igual ao diferencial de temperatura da zona não queimada (dT_u); e que os diferenciais das frações molares dx_b e da fração de massa queimada df_b são iguais a zero, pois não há reações químicas ou zona queimada durante estas fases.

A centelha na vela de ignição determina o início da combustão. Os valores de p , T_u neste instante são as condições iniciais do modelo termodinâmico de duas zonas de combustão que descreve a queima da mistura de ar e combustível. O modelo de duas zonas de combustão determina as taxas de variação de pressão dp/dt , temperaturas dT_b/dt , dT_u/dt , fração queimada df_b/dt e frações molares dx_b/dt dos gases de combustão. Como as válvulas estão fechadas durante a combustão, não ocorrem trocas de massa com o meio externo e as taxas de variação do número de mols de ar, combustível e gases residuais dn_a/dt , dn_f/dt e dn_p/dt são negativas, e devem-se à redução do número de mols de gases contidos na zona não queimada.

Ao final do processo de combustão a massa de produtos da combustão é transferida da zona queimada para a não queimada, passando a constituir os gases residuais do próximo ciclo, cuja composição é fixada no instante de abertura da válvula de escapamento.

Desta forma, as condições iniciais do modelo de duas zonas de combustão são determinadas pelo modelo de escapamento, admissão e compressão; enquanto as condições iniciais do modelo de escapamento, admissão e compressão são determinadas pelo modelo de duas zonas de combustão, tal como ocorre no motor. O modelo termodinâmico espelha desta forma a realidade, tornando assim difícil o estabelecimento das condições iniciais de cada processo, que são sempre as condições finais do processo anterior.

Para resolver este impasse é necessário arbitrar as condições iniciais em algum ponto e simular o processo ao longo de vários ciclos; ou então estabelecê-las por considerações de conservação de massa e energia a partir de um ponto conhecido.

Determinação da fração de massa queimada pelo modelo de diagnose

O modelo termodinâmico de diagnose determina a fração de massa queimada em função das curvas de pressão experimental e de volume do cilindro; a cada dado experimental de pressão corresponde um dado de saída do modelo.

Ajusta-se uma função de Wiebe aos dados de saída do modelo de diagnose, a função a ser minimizada é o somatório das diferenças entre estes e a curva, e os parâmetros a serem ajustados são os da função de Wiebe.

Determinação da pressão pelo modelo de predição

O modelo de duas zonas de combustão determina as taxas de variação de pressão dp/dt , temperaturas dT_b/dt , dT_u/dt , fração queimada df_b/dt e frações molares dos gases de combustão dx_b/dt . Para isto é necessário especificar a taxa aparente de queima de combustível (função de Wiebe, que pode ser determinada pelo procedimento descrito na seção anterior) e o modelo de transferência de calor através das paredes do cilindro.

O modelo de escapamento, admissão e compressão determina as taxas de variação da pressão dp/dt e da temperatura dT_u/dt no interior do cilindro, e das vazões molares de ar dn_a/dt , combustível dn_f/dt e gases residuais dn_p/dt através das válvulas de admissão e escapamento.

O fluxograma descritivo do procedimento de simulação do modelo utilizado para a identificação dos ciclos adotado neste trabalho está mostrado na Figura 26. Através deste fluxograma pode-se ver que os modelos termodinâmicos são escolhidos pela rotina de simulação, de acordo com a posição do virabrequim. As fases do ciclo são identificadas pela posição das válvulas de admissão e escapamento, e pelo ângulo de avanço da ignição. Após isto, o modelo de escapamento, admissão e compressão é utilizado durante as fases correspondentes, enquanto o modelo de duas zonas é utilizado durante as fases de combustão e expansão.

Fluxograma de identificação dos tempos do ciclo

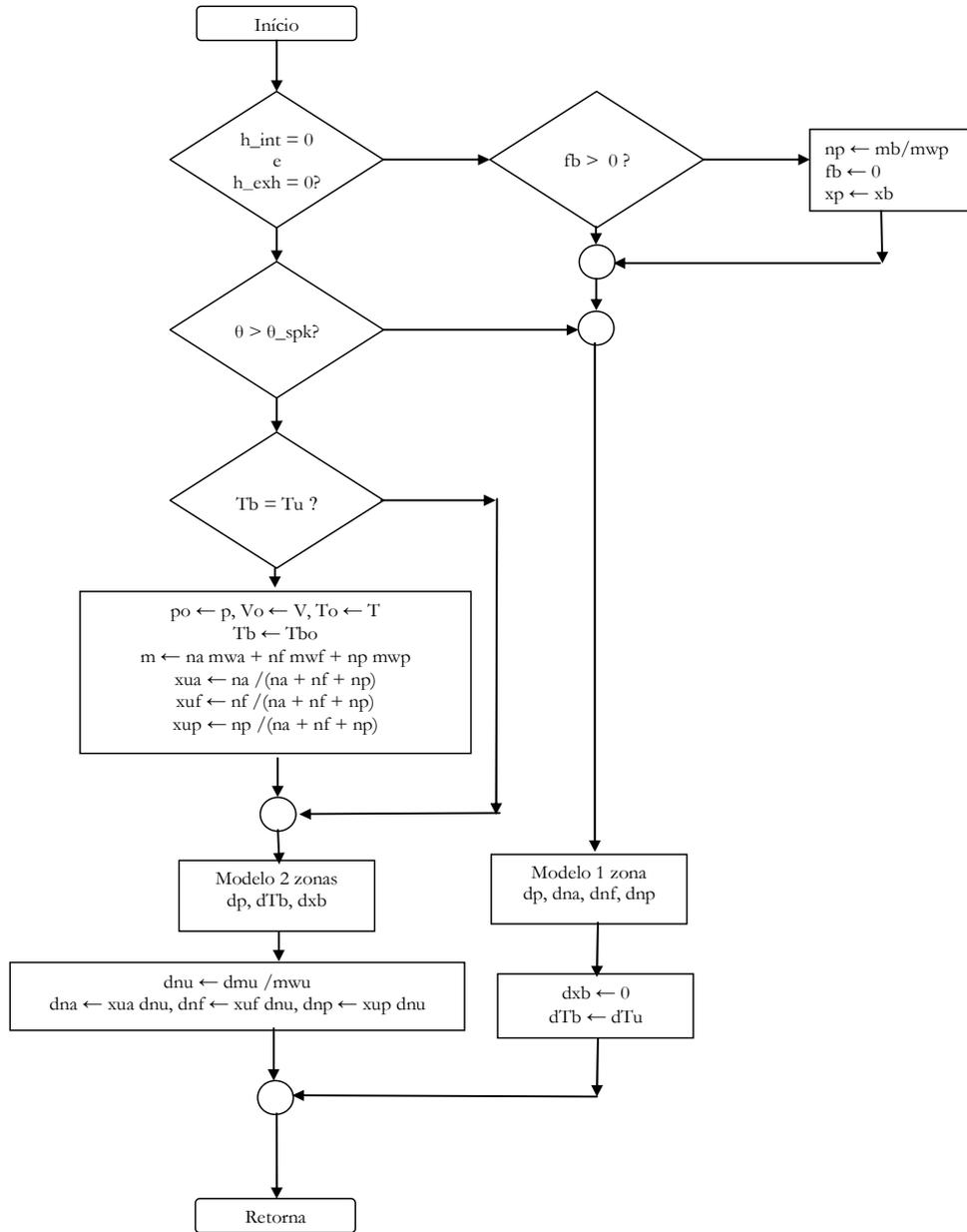


Figura 26: Fluxograma descritivo do modelo de simulação utilizado para a identificação dos ciclos.

3.2 Descrição dos Experimentos

O esquema da montagem experimental adotado no procedimento experimental está descrito na Figura 27. O sistema de medição é composto por sensores, equipamentos de aquisição de dados e equipamentos de controle, devidamente montados para medir as variáveis de interesse no motor CFR.

Segue a descrição do sistema de aquisição de dados, do sistema de controle, do tratamento de dados efetuado e do motor CFR, do cálculo do volume do cilindro em função da posição do virabrequim e da aquisição dos dados de pressão experimental.

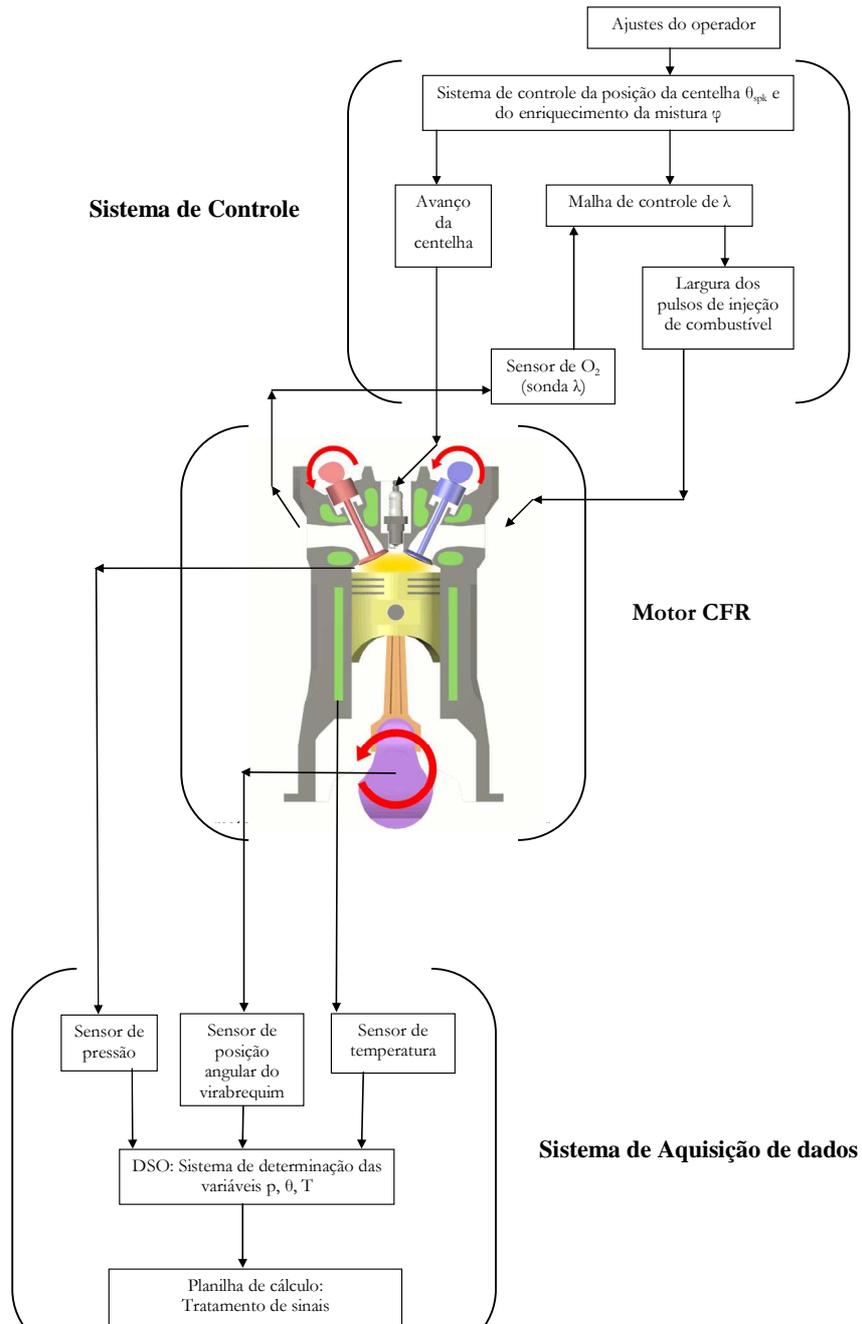


Figura 27: Esquema da montagem do sistema experimental.

3.2.1 Sistema de aquisição de dados

A posição angular do virabrequim é medida por amostragem por um sensor magnético de relutância variável. A passagem do flanco descendente do sinal do sensor de posição por zero indica o ponto em que o virabrequim passa por 15° APMS. As demais posições são determinadas a partir da hipótese de movimento circular uniforme. A Figura 29 (a) mostra o sinal do sensor de posição do virabrequim.

A centelha de ignição é disparada pelo corte da corrente no enrolamento primário da bobina de ignição. O sinal da tensão de excitação da bobina é mostrado na Figura 29 (b). O flanco descendente indica o instante da centelha e do início do processo de combustão.

A pressão no interior do cilindro do motor CFR é adquirida para diversas taxas de compressão, correspondentes a diversas posições de seu cabeçote. Estas são ajustadas continuamente pelo movimento de uma alavanca (vide Figura 31) e indicadas por um relógio comparador. Neste trabalho foram utilizadas taxas de compressão de 8 e 10.

Os dados experimentais de pressão foram medidos por um sensor dinâmico de fibra ótica, Optrand, modelo D312A8-QA, conforme mostra a Figura 28. O sensor mede numa faixa de 0 a 200 bar, operando com uma sensibilidade de 1,53 mV/psi e frequência de passagem de 1 Hz a 25 kHz. O sinal do sensor de pressão é mostrado na Figura 29 (c).



Figura 28: Vista do sensor de pressão, (Wlodarczyk, 1999)

Os sinais mostrados na Figura 29 foram adquiridos por um osciloscópio digital (DSO, acrônimo para digital storage oscilloscope) e transferidos a um dispositivo de memória estática, gravados na forma de um arquivo texto ASCII (*.csv). A análise dos dados foi efetuada em uma planilha eletrônica de cálculo, consistindo na filtragem de ruídos, compensação da resposta de frequência, derivação numérica do sinal do sensor de pressão, bem como na determinação do volume do cilindro e de sua taxa de variação.

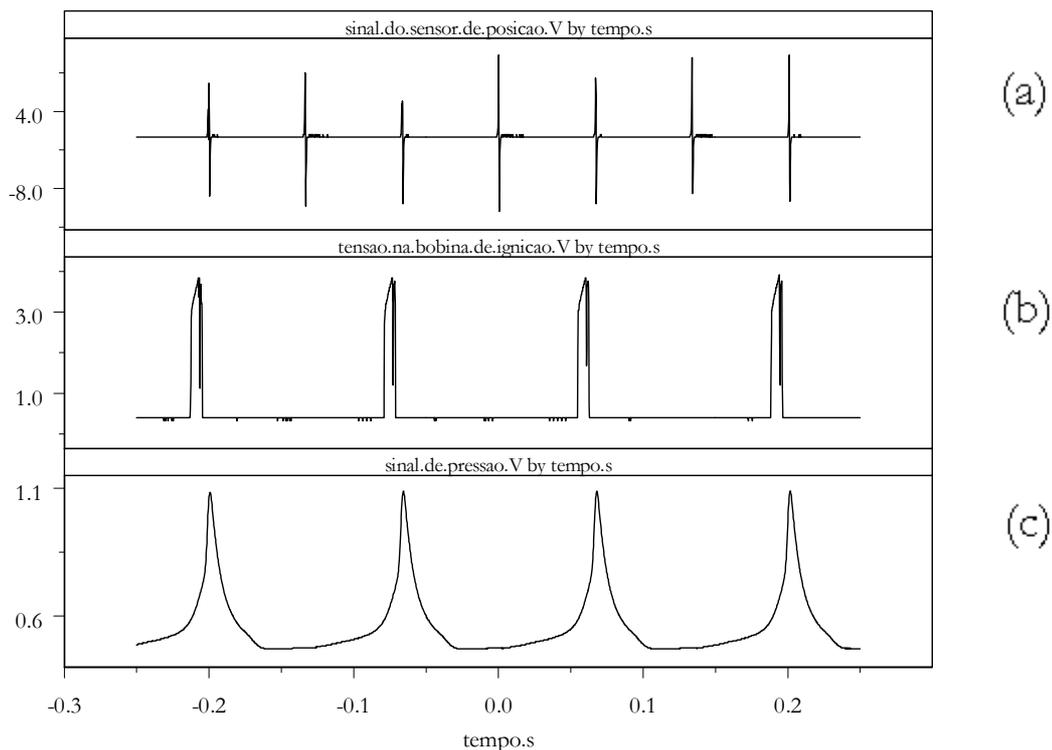


Figura 29: Sinais nas entradas do osciloscópio: (a) sinal do sensor de posição do virabrequim; (b) sinal da tensão de excitação do enrolamento primário da bobina de ignição; (c) sinal do sensor de pressão na câmara de combustão

3.2.2 Sistema de Controle

O sistema de controle foi desenvolvido para manter o avanço da ignição e o enriquecimento da mistura nas condições desejadas. Ele foi instalado de modo a atender as necessidades de interligação entre os sensores, as variáveis a serem medidas e os atuadores no motor CFR (bicos injetores, vela de ignição e resistências de aquecimento).

Uma unidade de controle eletrônica programável (ECU, acrônimo para Electronic Control Unit) foi utilizada para manter o enriquecimento da mistura φ constante, e também para ajustar o avanço da ignição θ_{spk} . O teor de oxigênio é medido por um sensor conhecido como sonda lambda, instalado na tubulação de escapamento e conectado à ECU. O controlador de enriquecimento da mistura atua sobre a largura de pulsos de injeção. O controle do avanço da ignição é efetuado pelo ajuste de um temporizador disparado pelo sensor de posição do virabrequim. O avanço de ignição é ajustado para posicionar o pico da curva de pressão a 15° ATDC.

A ECU é conectada por um cabo serial do tipo USB a um microcomputador que lhe serve de interface homem-máquina. O operador digita no teclado do notebook quaisquer valores de ajuste do enriquecimento da mistura e do avanço da ignição, e as malhas internas à ECU os controlam. As malhas são fechadas pelos sinais de um sensor de oxigênio ligado à tubulação de escapamento e de um sensor de posição angular fixado ao bloco do motor.

As temperaturas do ar de admissão, do óleo do cárter e da água de refrigeração são medidas por sensores NTC (acrônimo para a palavra inglesa Negative Temperature Coefficient) e mantidas constantes por controladores eletrônicos ligados a resistências de aquecimento.

3.2.3 Tratamento de dados experimentais de pressão

Włodarczyk (1998a, 1998b, 1999a, 1999b) descreveu em uma série de artigos sobre o princípio de funcionamento e as aplicações do sensor utilizado neste trabalho (marca Optrand). O princípio de funcionamento do sensor é a modulação do reflexo de um feixe de luz por uma membrana espelhada, deformada pela pressão interna do cilindro e conectada por uma fibra ótica a um diodo emissor de luz (LED, acrônimo para Light Emitting Diode). A intensidade do reflexo de luz é comparada com a emitida por um circuito eletrônico e amplificada, de forma que a tensão de saída do amplificador é proporcional à pressão atuante na membrana do sensor.

Um sensor deste tipo mede apenas as variações de pressão, sem responder à pressão estática. Seu sinal de saída é distorcido pela resposta imperfeita aos componentes de baixa frequência da pressão, além de acréscimo de ruído devido às interferências eletromagnéticas. A Figura 30 permite visualizar os efeitos da utilização de um sensor de pressão que apresenta resposta em frequência limitada. Este sensor apresenta uma resposta finita de frequência, ou seja, ele apresenta uma limitação de resposta em baixas frequências. Usando como exemplo o caso de um pulso retangular (Figura 30 (a)) pode-se observar que ao sair de um filtro passa-altas o sinal apresenta o formato mostrado na Figura 30 (b). Conforme Rao, 2006, o sinal de saída é acrescido de uma exponencial cuja constante de tempo é RC após o flanco descendente do pulso de entrada. O mesmo efeito distorcivo ocorre com o sinal de pressão após os processos de compressão e expansão, quando a pressão no interior do cilindro sobe e desce rapidamente gerando um pulso de forma aproximadamente triangular.

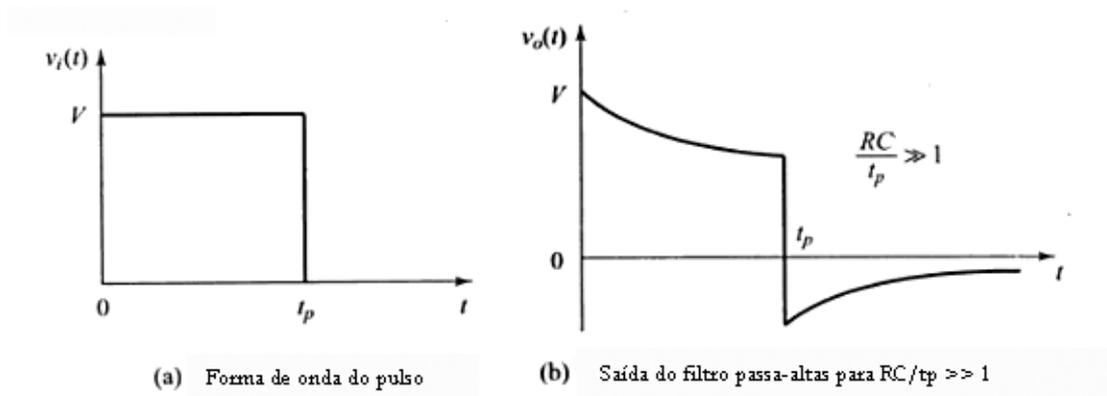


Figura 30: Resposta de um filtro passa-altas a um pulso retangular (Rao, 2006).

Portanto, os dados experimentais devem ser tratados para compensar a resposta em frequência não ideal do sensor e filtrar os ruídos. A compensação de frequência é feita pela aplicação de um filtro de resposta inversa à do sensor de pressão, no domínio de frequência.

Durante a aquisição de dados, o intervalo de amostragem utilizado foi de 200 μ s, correspondente a uma frequência de aquisição de 5 kHz. De acordo com o teorema de Nyquist, a maior frequência possível de ser adquirida pelo osciloscópio nestas condições é de 2,5 kHz. O osciloscópio é ajustado para que seu sincronismo seja feito pelo sinal da posição do virabrequim.

Para reduzir o ruído contido nas curvas experimentais de pressão, calcula-se inicialmente sua taxa de variação pelo método numérico de MLS (acrônimo para Moving Least Squares) (Levin, 1998), ajustando-se um polinômio de terceiro grau aos 32 pontos mais próximos de cada ponto da curva experimental de pressão, derivando o polinômio assim obtido e determinando o valor de sua derivada no ponto central. A determinação da curva experimental de pressão compensada em frequência e de sua taxa de variação exige a aplicação da transformada de Fourier.

O procedimento continua com o ajuste de uma série de Fourier à derivada numérica da curva de pressão calculada pelo método MLS, ao longo de quatro ciclos do motor. Em seguida, os coeficientes desta série são modificados por um filtro de resposta inversa à do sensor, para compensar a distorção da forma de onda de pressão causada pela limitação de sua resposta em baixas frequências.

Assim, a filtragem de ruído ocorre pela característica intrínseca do método de derivação por MLS, que se comporta como um filtro passa-baixas; e também pelo truncamento da série de Fourier no seu 80º harmônico. A verificação do método de filtragem de ruído é feita graficamente, por comparação entre os dados experimentais (representados nos gráficos por marcadores) e a função que os representa após a filtragem (representada como uma linha sólida que deve passar pelas posições médias da nuvem de dados experimentais).

3.2.4 Considerações sobre o motor CFR

A Figura 31 mostra o motor CFR e a Figura 32 sua câmara de combustão, válvulas e dutos de admissão e escapamento.

Para efetuar os ensaios, o motor CFR é posto a girar acionado pelo motor elétrico síncrono até que as temperaturas da água de refrigeração, do óleo do cárter e do ar de admissão se estabilizem. Em seguida, liga-se as chaves que comutam a injeção de combustível e a ignição.

O motor CFR é construído de tal forma que a velocidade angular de seu virabrequim é mantida próxima a 900 rpm por um gerador síncrono ligado à rede elétrica, e medida por um tacômetro digital que indicou 898 rpm durante os ensaios. Portanto, a frequência fundamental da forma de onda da pressão no interior do cilindro é 7,48 Hz – 7,5 vezes o valor da frequência de corte inferior do sensor especificada por seu fabricante é 1Hz, enquanto a frequência de corte superior é 25 kHz, logo o espectro de frequência gerado pelo motor CFR está dentro da faixa de passagem do sensor de pressão. Por outro lado, 2,5 kHz são 334 vezes o valor da frequência fundamental da forma de onda de pressão, significando que a taxa de amostragem do osciloscópio é suficiente para medir até o 334º harmônico destes dados. A faixa de passagem do circuito do osciloscópio vai desde 0 Hz até 20MHz. Assim, a limitação da resposta de baixa frequência deve-se apenas ao sensor de pressão, enquanto a limitação de alta frequência deve-se apenas à taxa de amostragem do osciloscópio.

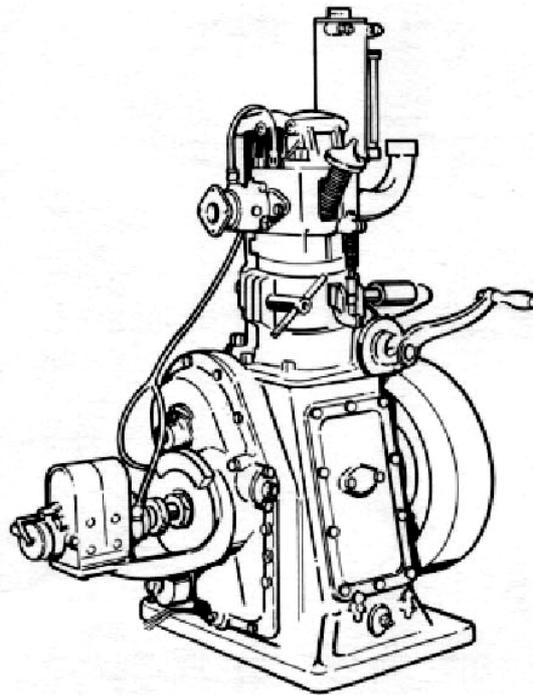


Figura 31: O motor CFR (Waukesha, Dresser Industries, 1980)

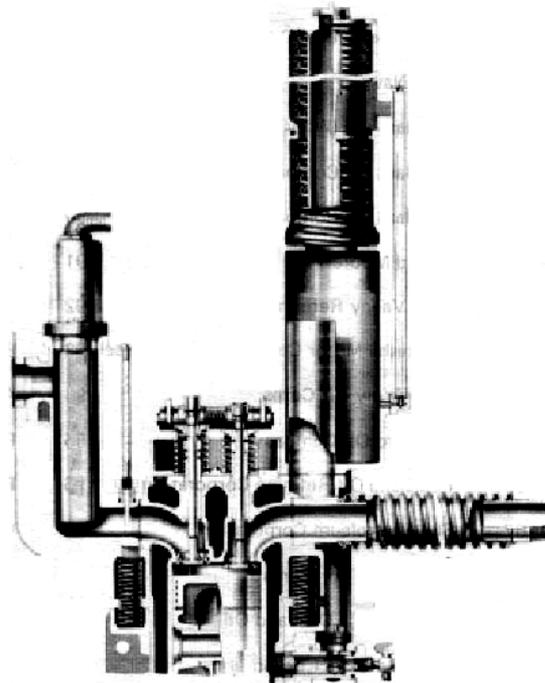


Figura 32: Corte transversal do motor CFR mostrando a câmara de combustão, as válvulas e os dutos de admissão e de escapamento (Waukesha, Dresser Industries, 1980)

3.3 Experimentos preliminares

Para a comparação entre os dados experimentais e os resultados de simulação é necessário conhecer a taxa de compressão do motor CFR e os coeficientes de descarga das válvulas de admissão e escapamento

O cálculo do volume relativo do cilindro em função da posição do virabrequim (detalhado no anexo D) e a aquisição dos dados de pressão experimental com o motor CFR acionado externamente também são detalhados neste sub-capítulo.

3.3.1 Volume relativo do cilindro em função da posição do virabrequim

O volume relativo $V(\theta)/V_c$ é calculado a partir da geometria do cilindro e da cinemática do mecanismo biela-manivela. Considera-se a hipótese de movimento circular uniforme. A determinação de $V(\theta)/V_c$ foi efetuada a partir da equação (5) detalhada no Anexo D:

$$\frac{V(\theta)}{V_c} = \left(1 + \frac{1}{2} (r_c - 1) \left(1 + \frac{L}{a} - \cos \theta - \sqrt{\left(\frac{L}{a} \right)^2 - \sin^2 \theta} \right) \right) \quad (64)$$

A posição angular θ do virabrequim é medida por amostragem por um sensor de relutância variável, o qual gera um pulso a cada passagem do virabrequim por 15° APMS, e interpolada pela hipótese de movimento circular uniforme nas demais posições. O osciloscópio utilizado na medição gera um arquivo com informações de tempo e pressão instantânea. Estes dados são transferidos por uma interface USB e gravados em uma memória estática em um microcomputador do tipo PC (acrônimo para a palavra *Personal Computer*). Os cálculos necessários são executados no ambiente de uma planilha eletrônica.

3.3.2 Aquisição dos dados de pressão experimental com o motor CFR acionado externamente

Para o caso do motor CFR acionado externamente a pressão p e o volume relativo V/V_c em função do tempo (proporcional a posição angular θ do virabrequim) estão mostradas na Figura 33. Os dados de pressão p foram medidos com o sensor de pressão dinâmico, obtidos com o motor CFR acionado externamente e queimando mistura estequiométrica de isoctano e ar atmosférico, para as taxas de compressão aparente iguais a 8 e 10.

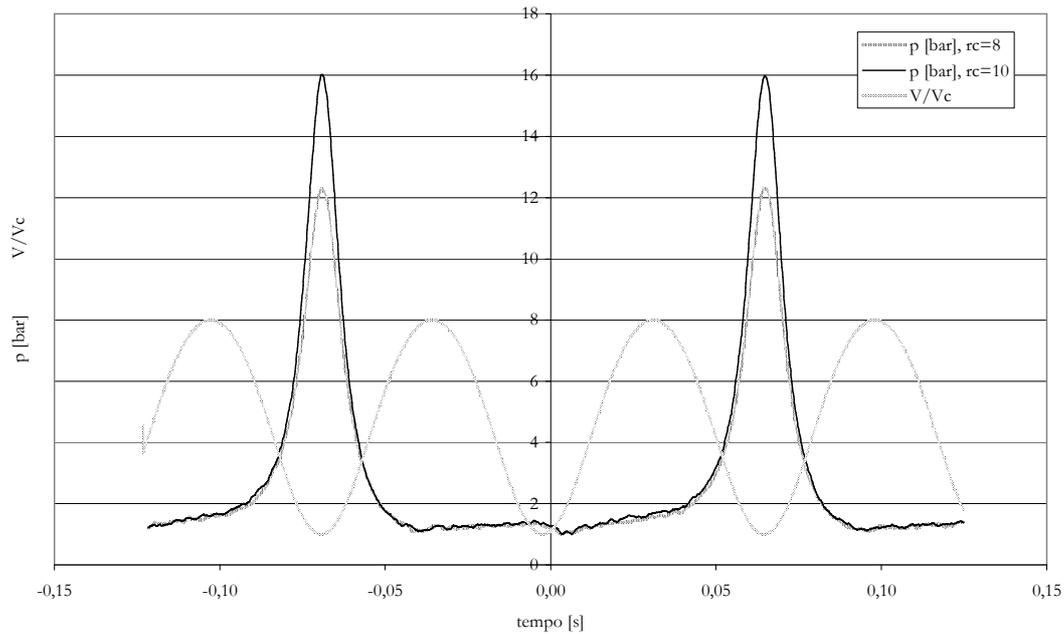


Figura 33: Curvas de pressão p e de volume relativo V/V_c em função do tempo, para taxas de compressão aparente iguais a 8 e 10, obtidas com o motor acionado externamente.

As taxas de compressão aparente devem ser corrigidas conforme item “3.3.3 Calibração do indicador de taxa de compressão do motor CFR”, resultante os valores correspondentes às taxas reais de 6,01 e 7,67.

Devido à natureza do sensor de pressão dinâmica ser insensível à componente contínua da pressão no interior do cilindro, é necessário acrescentar uma constante arbitrária aos dados de pressão para traçar o gráfico. A pressão mínima foi arbitrada em 1 bar.

3.3.3 Calibração do indicador de taxa de compressão do motor CFR

O indicador de taxa de compressão do motor CFR necessitou de uma calibração. O gráfico da Figura 34 foi traçado a partir de dados experimentais de pressão medidos no motor CFR acionado externamente por motor elétrico. Ele mostra a diferença entre as pressões máxima e mínima ($p_{\max} - p_{\min}$) ao longo do ciclo em função da taxa de compressão aparente indicada pelo ponteiro do instrumento que equipa o motor. A equação que aparece nesta figura corresponde a um polinômio de segundo grau ajustado aos dados experimentais por regressão linear.

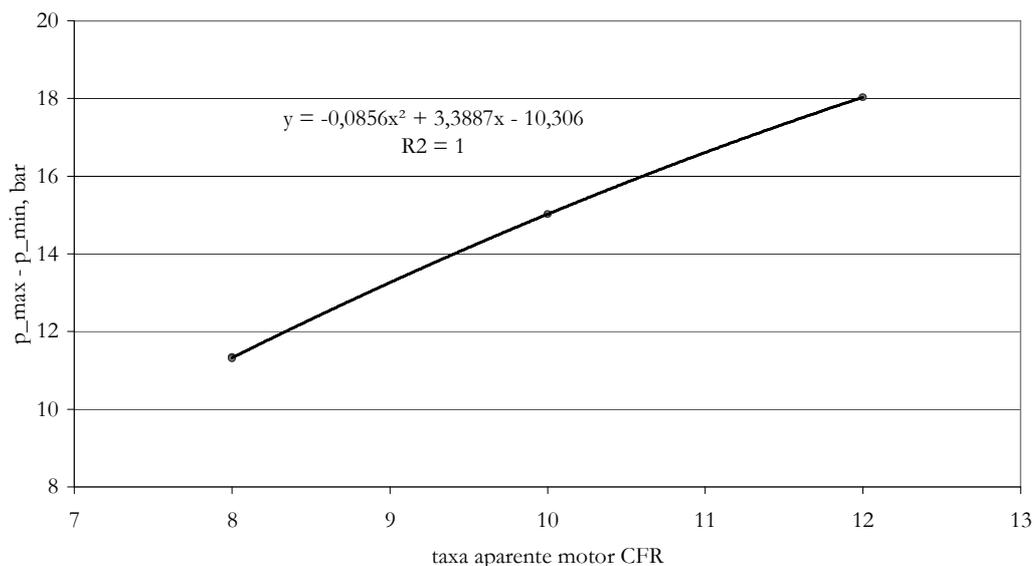


Figura 34: Diferença entre as pressões experimental máxima e mínima do ciclo em função da taxa de compressão aparente, obtidas com o motor CFR acionado externamente.

Já as curvas da Figura 35 foram obtidas por simulação computacional para o caso do motor CFR acionado externamente, com a taxa de compressão $r_c = 6,01$. Nesta figura a linha sólida com marcadores circulares representa a pressão, a cinza o volume; e a linha tracejada, a temperatura do ar no interior do cilindro.

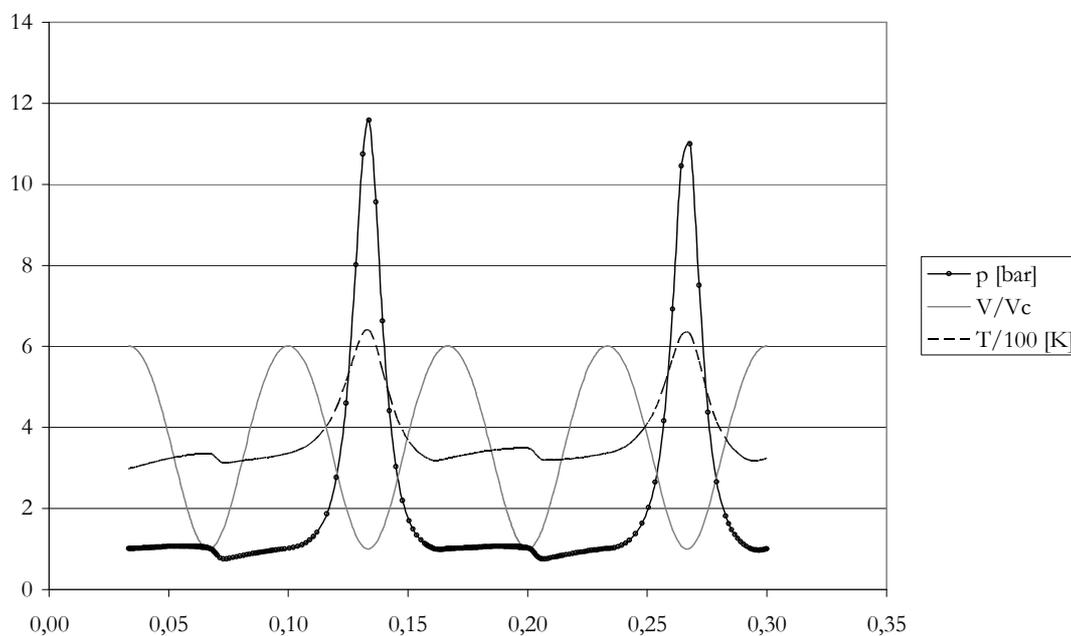


Figura 35: Resultados da simulação da pressão p , do volume relativo V/V_c e da temperatura T para o motor acionado externamente com a taxa de compressão $r_c = 6,01$.

Resultados semelhantes foram obtidos para diferentes taxas de compressão, utilizando as seguintes condições iniciais:

Pressão atmosférica: 1,013 bar
 Temperatura do ar: 298 K
 Posição do pistão: PMI, ao final da admissão

A partir desses resultados foi construída a Tabela 2, que mostra a diferença entre a pressão máxima e mínima ($p_{\max} - p_{\min}$) do ciclo para diferentes taxas de compressão.

Tabela 2: Pressões máximas e mínimas e sua diferença ($p_{\max} - p_{\min}$) no cilindro (bar), em função da taxa de compressão do modelo termodinâmico (r_c).

r_c	P_{\max}	P_{\min}	$P_{\max} - P_{\min}$
9	18,96	0,916	18,05
8	16,42	0,872	15,55
7	14,54	0,808	13,74
6	11,97	0,728	11,24
5	9,72	0,626	9,10
4	7,19	0,502	6,69

Os valores da diferença ($p_{\max} - p_{\min}$) são convenientes para a calibração do indicador de taxa de compressão do motor CFR, uma vez que o sensor de pressão utilizado é capaz de medir as variações de pressão no interior do cilindro, mas não o seu valor absoluto.

Os valores da Tabela 2 permitiram construir o gráfico da Figura 36. A expressão que aparece nesta figura corresponde a um polinômio de segundo grau ajustado aos dados por regressão linear. Este polinômio permite estimar a taxa de compressão r_c do modelo termodinâmico, em função da variação entre a pressão máxima e mínima do ciclo.

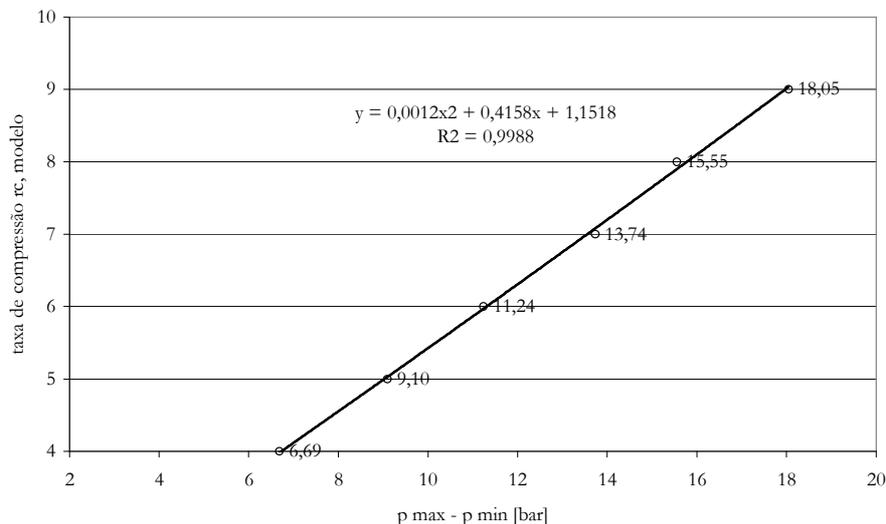


Figura 36: Taxa de compressão do modelo termodinâmico r_c em função da diferença entre as pressões máxima e mínima ao longo do ciclo, obtida por simulação do motor acionado externamente.

O sistema de equações formado pelos polinômios mostrados nas Figuras 34 e 36 possibilita correlacionar a taxa de compressão r_c do modelo termodinâmico com a taxa aparente de compressão acusada pelo indicador montado no motor CFR. Assim obtém-se a seguinte expressão:

$$rc_sim = -3,00598 + 1,3252 x_c - 0,0196953 x_c^2 - 0,000696175 x_c^3 + 8,79283 \cdot 10^{-6} x_c^4 \quad (65)$$

onde rc_sim é a taxa de compressão do modelo termodinâmico e x_c é a taxa de compressão aparente do motor CFR. A Figura 37 ilustra o comportamento desta função no intervalo das taxas de compressão ensaiadas.

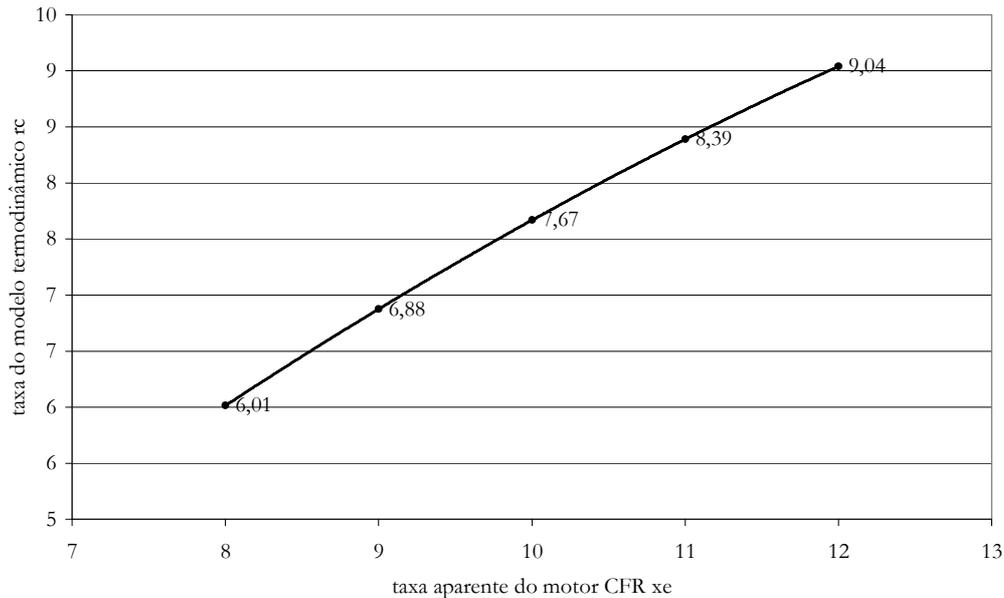


Figura 37: Função de calibração da taxa de compressão do motor CFR

3.3.4 Determinação dos coeficientes de descarga das válvulas

O perfil de deslocamento das válvulas de admissão e escapamento foi determinado instalando-se um micrômetro sobre uma base magnética presa ao bloco do motor. O perfil foi determinado girando o motor manualmente, lendo as marcações da posição angular do virabrequim no volante e medindo o levantamento das válvulas com o micrômetro de ponteiro. As Figuras 22 e 23 (Capítulo 2) mostram os perfis de afastamento das válvulas de admissão e exaustão de suas sedes, em função da posição angular do virabrequim.

Para avaliar os coeficientes de descarga através das válvulas foi utilizada uma bancada de escoamento Superflow 110, igual àquela mostrada na Figura 38. A diferença de pressão antes e depois da válvula foi mantida constante e a abertura da mesma foi alterada entre 1 e 6 mm, em intervalos de 1 mm. Os valores da vazão através da válvula foram fornecidos pelo medidor instalado na bancada.



Figura 38: Vista geral da bancada de fluxo *Superflow 110*. Os indicadores de pressão são manômetros de coluna hidrostática, a peça sob ensaio está montada sobre uma superfície horizontal logo acima dos botões de controle.

Sendo a bancada de fluxo de fabricação norte-americana, as medições de vazão foram efetuadas em cfm (1 cfm equivale a $4,719 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$), estabelecendo-se através das válvulas uma diferença de pressão de 2,491 kPa (ou 1000 in_H₂O @ 39.2°F). A Tabela 3 mostra os dados experimentais de vazão fornecidos pela bancada.

Tabela 3. Valores experimentais vazão através das válvulas de admissão e escapamento do motor CFR, em função de sua abertura.

Abertura da válvula [mm]	cfm adm	cfm exh
0	0	0
1	6,7	9,7
2	11,6	16,2
3	16,0	24,1
4	19,3	32,0
5	22,9	37,8
6	26,8	44,8

Para determinar o coeficiente de descarga foi utilizada a Equação 66, a qual expressa a vazão mássica real em função das condições na seção de garganta (subscrito t) e das condições à jusante da válvula (subscrito 0) (Heywood, 1989).

$$\dot{m}_{\text{real}} = \frac{C_d A_t P_0}{\sqrt{RT_0}} \left(\frac{P_t}{P_0} \right)^{\frac{1}{k}} \sqrt{\frac{2k}{k-1} \left(1 - \left(\frac{P_t}{P_0} \right)^{\frac{k-1}{k}} \right)} \quad (66)$$

Para calcular os coeficientes de descarga C_d foi utilizada a vazão real fornecida pela bancada e a vazão teórica do escoamento isoentrópico de ar através de uma restrição com a mesma área de cortina, definida como o produto do perímetro da sede pela altura de levantamento (*lift*) da válvula. O diâmetro da sede das válvulas de admissão e escapamento no motor CFR é igual a 34,19 mm. Os coeficientes de descarga de admissão $C_{d_{\text{adm}}}$ e de escapamento $C_{d_{\text{exh}}}$ obtidos por este procedimento são mostrados na Tabela 4.

Tabela 4. Coeficientes de descarga da admissão e do escapamento.

abertura da válvula [mm]	dV/dt iso [m3/s]	dV/dt adm [m3/s]	dV/dt exh [m3/s]	Cd adm	Cd exh
0	0	0	0		
1	0,0069	0,0032	0,0046	0,459	0,665
2	0,0138	0,0055	0,0077	0,397	0,556
3	0,0207	0,0075	0,0114	0,364	0,549
4	0,0276	0,0091	0,0151	0,330	0,548
5	0,0345	0,0108	0,0178	0,314	0,517
6	0,0414	0,0127	0,0212	0,306	0,512

A Tabela 5 mostra as propriedades termodinâmicas do ar nas condições de estagnação, utilizadas no cálculo dos coeficientes de descarga.

Tabela 5. Propriedades termodinâmicas do ar nas condições de estagnação.

To	298	K
R	8,314472	J/(mol K)
mw	28,7947	g/mol
R/mw	288,75	J/(kg K)
k	1,4	
Po	101,3	kPa
Pt	0,975	kPa

Capítulo 4

Resultados

4.1 Acionamento externo do motor

Conhecer a taxa de compressão real é necessário, pois esta é um valor de entrada para o modelo termodinâmico. A única indicação da taxa durante os ensaios é a posição do relógio comparador, que mede a altura do cabeçote. A medição direta do volume da câmara de combustão do motor CFR é inacessível, devido a sua característica construtiva. Assim, não é possível medir a taxa de compressão real, e sim uma taxa de compressão aparente. Então, é necessário estabelecer uma correlação entre as taxas que geram as mesmas pressões experimentais e simuladas. Esta correlação pode ser obtida com o levantamento da curva de pressão com o motor acionado externamente.

A curva de pressão do motor acionado externamente também é necessária. Ela possibilita o cálculo de um dos parâmetros da função de Woschni, o qual descreve a troca de calor entre os fluidos de trabalho e as paredes do cilindro durante a combustão. Se o motor estiver sendo acionado externamente o único fluxo de calor possível é entre o ar comprimido e as paredes do cilindro. Desta forma consegue-se avaliar se o coeficiente de convecção previsto pela fórmula está correto (esta avaliação não é efetuada neste trabalho).

Nesta seção são apresentados os resultados experimentais e simulados quando o motor CFR é acionado externamente, ou seja, enquanto a ignição e a injeção de combustível permanecem desligadas. Isto permite a separação dos efeitos do movimento do pistão dos efeitos da queima do combustível sobre a curva de pressão. Com este procedimento torna-se possível a comparação entre a taxa de compressão aparente e a real e a obtenção da curva de pressão necessária para validar o modelo termodinâmico para as fases de admissão, compressão e escapamento. Devido à característica de resposta sensor de pressão utilizado ser limitada em baixas frequências, será efetuada a correção dos dados experimentais. Por fim, os dados experimentais corrigidos serão comparados com os resultados da simulação.

Dados experimentais

As Figuras 39 e 40 mostram os diagramas p V correspondentes aos dados experimentais da Figura 33, ou seja, os resultados obtidos no motor CFR acionado externamente com taxas de compressão aparente de 8 e 10.

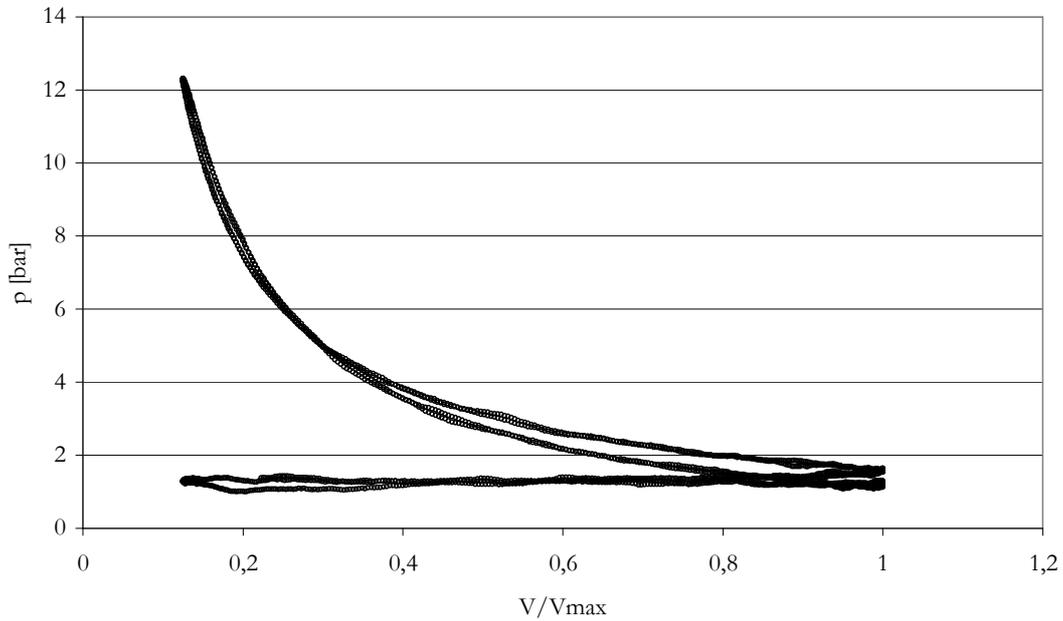


Figura 39: Diagrama p V experimental do motor CFR acionado externamente, obtido com taxa de compressão aparente igual a 8.

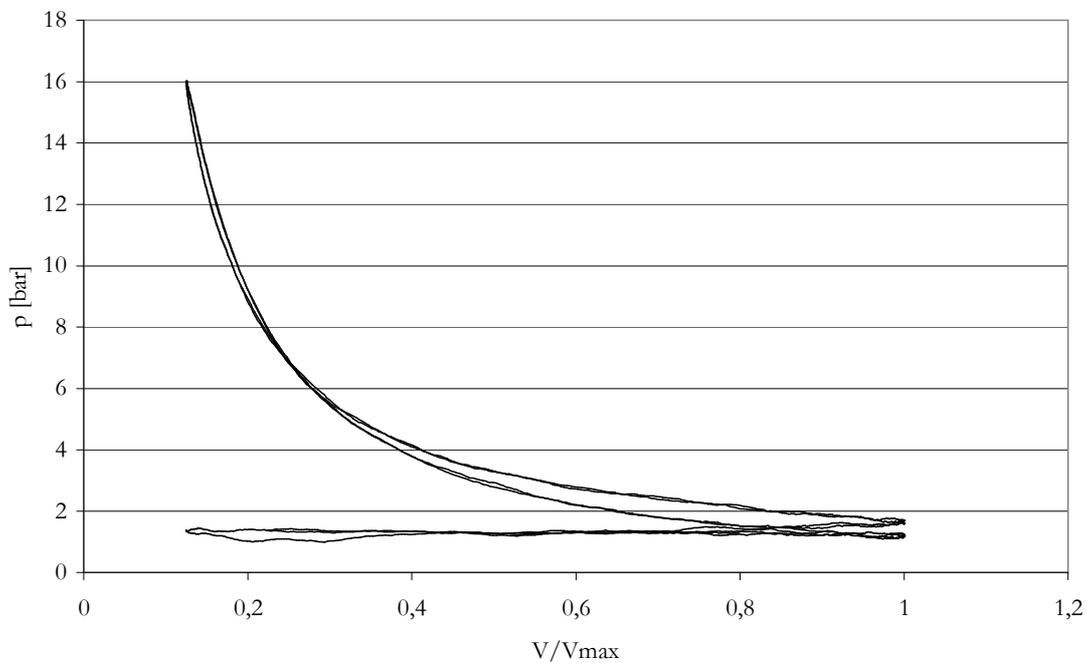


Figura 40: Diagrama p V experimental do motor CFR acionado externamente, com taxa de compressão aparente igual a 10, obtido pela plotagem de dados de dois ciclos.

Resultados da simulação

Os resultados obtidos com o modelo termodinâmico para as condições de acionamento externo são mostrados como diagramas p V nas Figuras 41 e 42. Para este cálculo foi considerada a correção da taxa de compressão, sendo empregadas as taxas de compressão aparentes de 8 e 10.

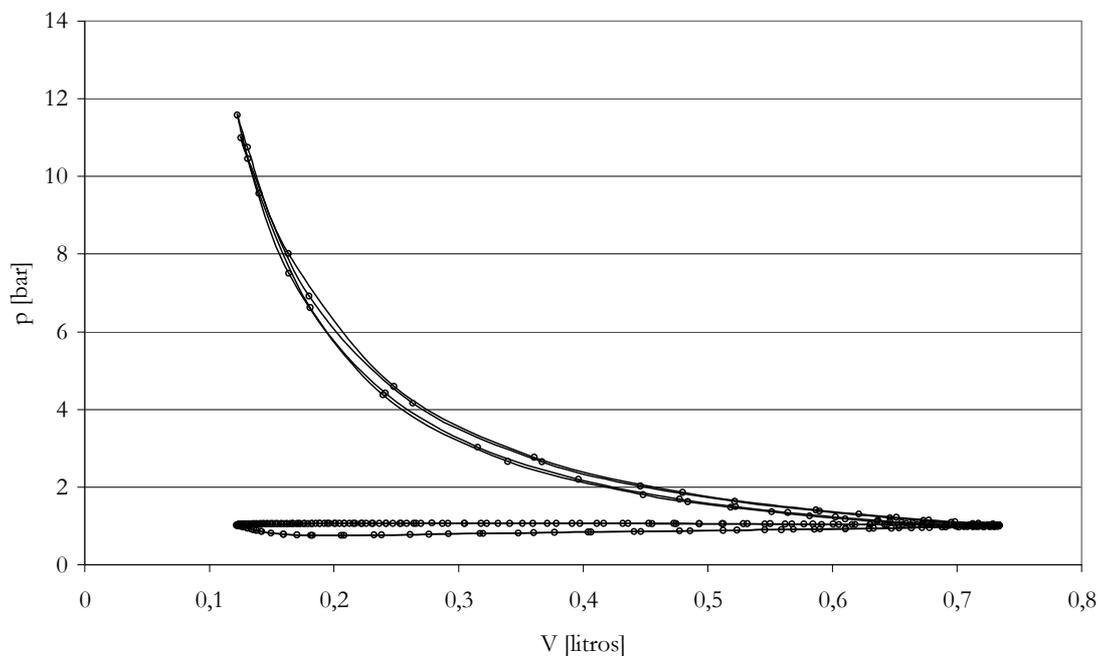


Figura 41: Diagrama p V simulado do motor CFR acionado externamente, com taxa de compressão aparente igual a 8 (Os marcadores circulares representam os valores determinados pela rotina de integração do modelo termodinâmico; a linha sólida é a interpolação destes pontos).

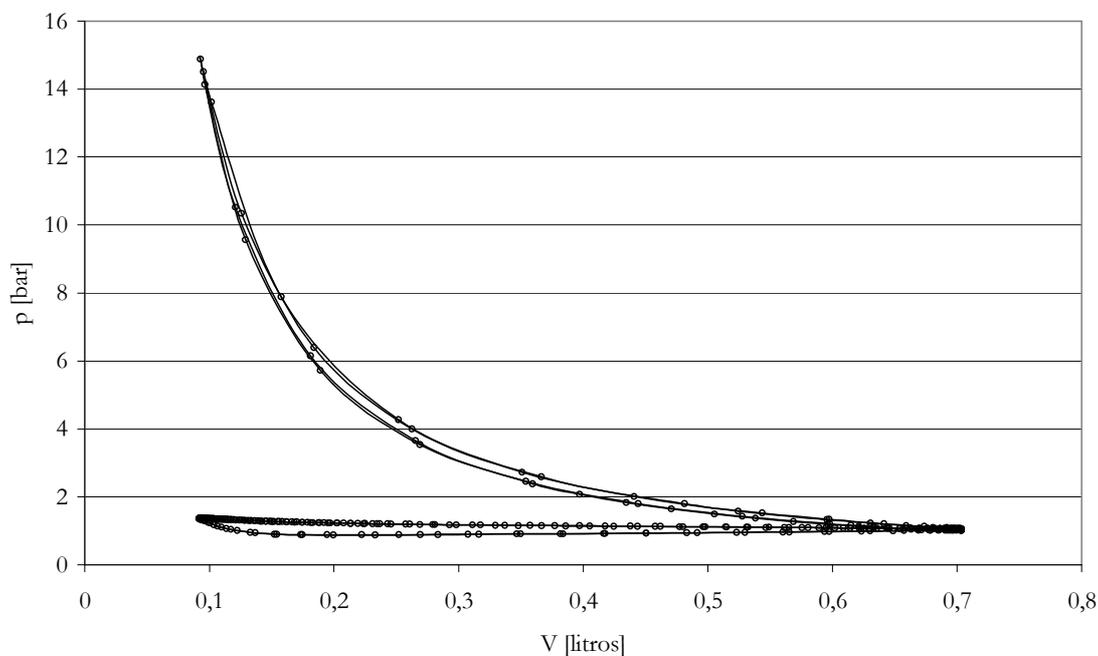


Figura 42: Diagrama p V simulado do motor CFR acionado externamente, com taxa aparente de compressão igual a 10. Os marcadores circulares representam os valores determinados pela rotina de integração do modelo termodinâmico; a linha sólida é a interpolação destes pontos.

Nota-se que a pressão simulada no interior do cilindro durante o escapamento é constante, e que no final da admissão a pressão é igual à de escapamento, o que corresponde ao comportamento esperado.

Comparação entre os dados experimentais e os resultados da simulação

Os dados experimentais de pressão sem tratamento foram comparados os resultados da simulação, conforme ilustra a Figura 43.

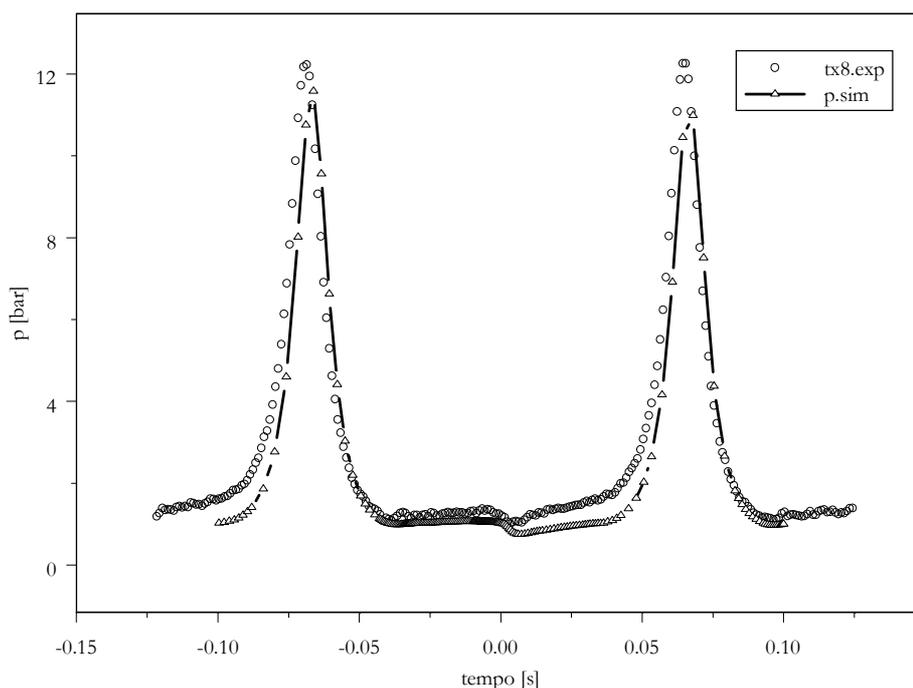


Figura 43: Comparação entre a pressão experimental (O) e a simulada sem compensação (- Δ -) no interior do cilindro.

O formato dos gráficos dos dados experimentais diverge do esperado, conforme a Figura 39; a Figura 40 e a Figura 43. Ao longo da fase de admissão a pressão medida apresenta um valor superior à pressão durante a fase de escapamento. Isto contraria o fato de que a pressão deve ser ligeiramente inferior à atmosférica durante a admissão, o que permitiria a admissão do ar no cilindro. Desta forma o fluxo de gás estaria contrariando o diferencial de pressão e, portanto, a primeira Lei da Termodinâmica. Se estes dados fossem usados para comparar com os resultados simulados, levaria a conclusão de que o modelo termodinâmico adotado estaria errado.

Além disto, o traçado do gráfico apresenta um laço de histerese durante as fases de compressão e expansão. Este laço só é possível se houver uma troca de calor muito intensa entre o ar e as paredes do cilindro, ou existe um erro sistemático na leitura da posição angular do virabrequim, ou, ainda, se existe uma distorção no sinal do sensor de pressão.

A troca térmica existe, pois existe fluxo de calor por convecção devido à diferença de temperatura entre o ar comprimido e as paredes do cilindro. No entanto seu valor numérico é pequeno (Woschni, 1967), o que descarta esta possibilidade. O possível erro sistemático na leitura da posição angular do virabrequim foi descartado após a verificação visual com o uso de uma lâmpada estroboscópica.

Considerando o exposto no item “3.2.4 Tratamento de dados experimentais de pressão” e após a verificação das possibilidades descritas acima, a discrepância deve-se principalmente à limitação da resposta do sensor de pressão em baixas frequências. Desta forma, existe a necessidade de corrigir os dados experimentais obtidos antes de sua comparação com os resultados simulados com o modelo termodinâmico.

Como não se dispõe de uma máquina que possibilite levantar o diagrama de Bode do sensor, o que permitiria a compensação dos dados experimentais, resta a alternativa do ajuste dos dados experimentais a partir dos dados simulados. No entanto, conhecendo-se um modelo físico paramétrico que descreva a resposta em frequência do sensor, pode-se ajustar os parâmetros para minimizar o somatório das diferenças quadráticas entre os resultados da simulação e os dados experimentais. Estes parâmetros são o coeficiente de amortecimento, a frequência natural, a sensibilidade e o zero.

A rotina adotada para a correção dos dados experimentais consistiu em aplicar um filtro de resposta inversa de segunda ordem no domínio de frequência aos coeficientes da transformada de Fourier a_i , b_i e a_0 dos dados experimentais de pressão. A saída do filtro são os coeficientes da transformada de Fourier dos dados experimentais corrigidos. Aplicando a transformada inversa de Fourier a estes coeficientes, resultam os valores da pressão experimental corrigida. Os dados corrigidos são comparados com os resultados da simulação e o somatório das diferenças quadráticas é minimizado. A minimização é efetuada pelo método de Newton ajustando-se os parâmetros coeficiente de amortecimento, frequência natural, sensibilidade e zero adotados no modelo físico adotado para o sensor.

A Figura 44 compara os resultados da simulação com os dados experimentais corrigidos, em função do tempo. Não há diferença significativa entre as duas curvas.

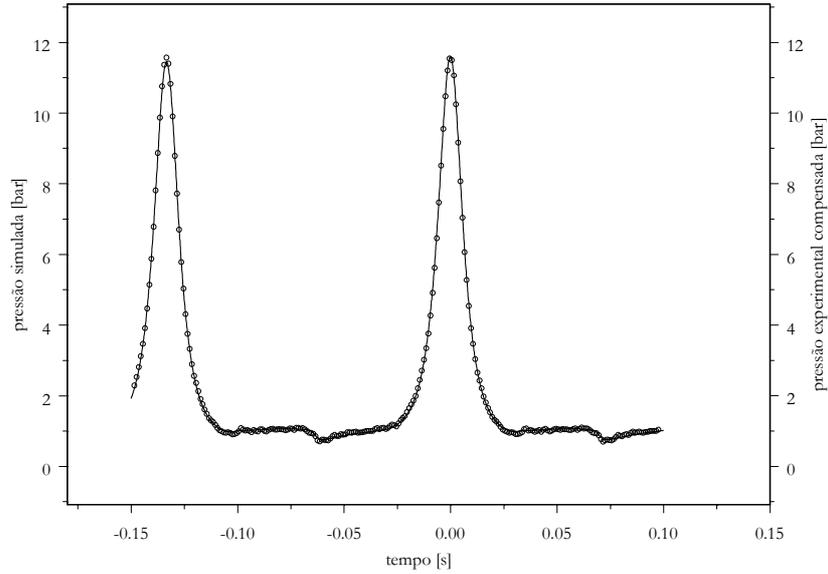


Figura 44: Comparação dos resultados da simulação (linha sólida -) com os resultados experimentais (marcadores circulares o) após tratamento do sinal (motor acionado externamente com taxa aparente igual a 8)

Esta coincidência entre os resultados simulados e os experimentais após o tratamento pode ser melhor observada na Figura 45, onde são mostrados os diagramas p V. Nesta figura os marcadores circulares representam os dados experimentais e a linha sólida preta corresponde aos valores da pressão simulada pelo modelo termodinâmico.

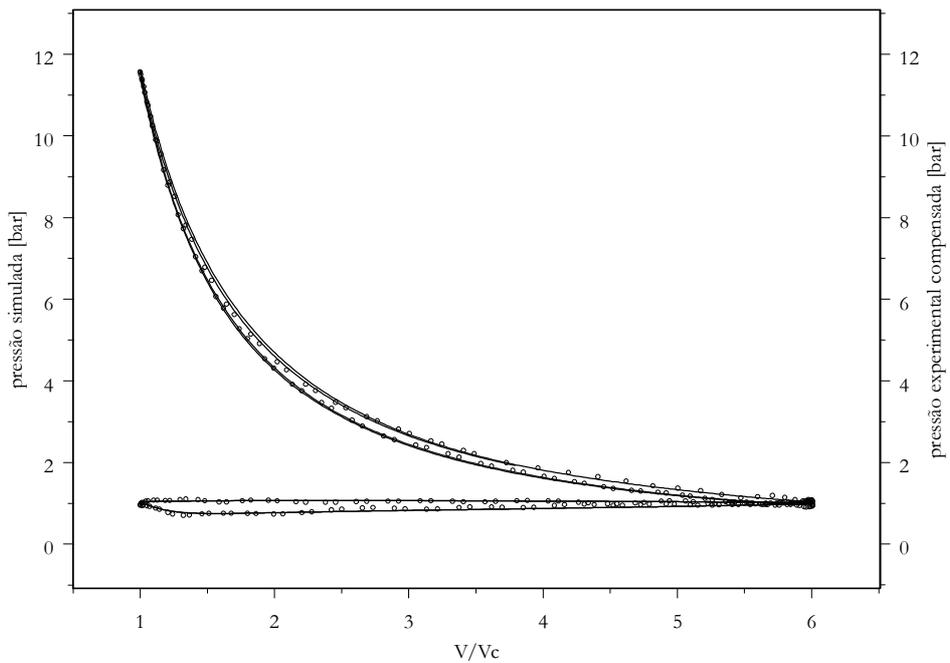


Figura 45: Diagramas p V experimental e simulado

4.2 Funcionamento normal do motor

Obtenção dos dados experimentais

Os dados do funcionamento normal do motor CFR foram obtidos de forma semelhante a utilizada pra o caso do motor acionado externamente.

Dados experimentais

As curvas de pressão e de volume relativo no interior do cilindro do motor CFR foram obtidas utilizando-se uma mistura estequiométrica de isooctano e ar atmosférico como combustível. Os resultados das curvas estão mostrados na Figura 46.

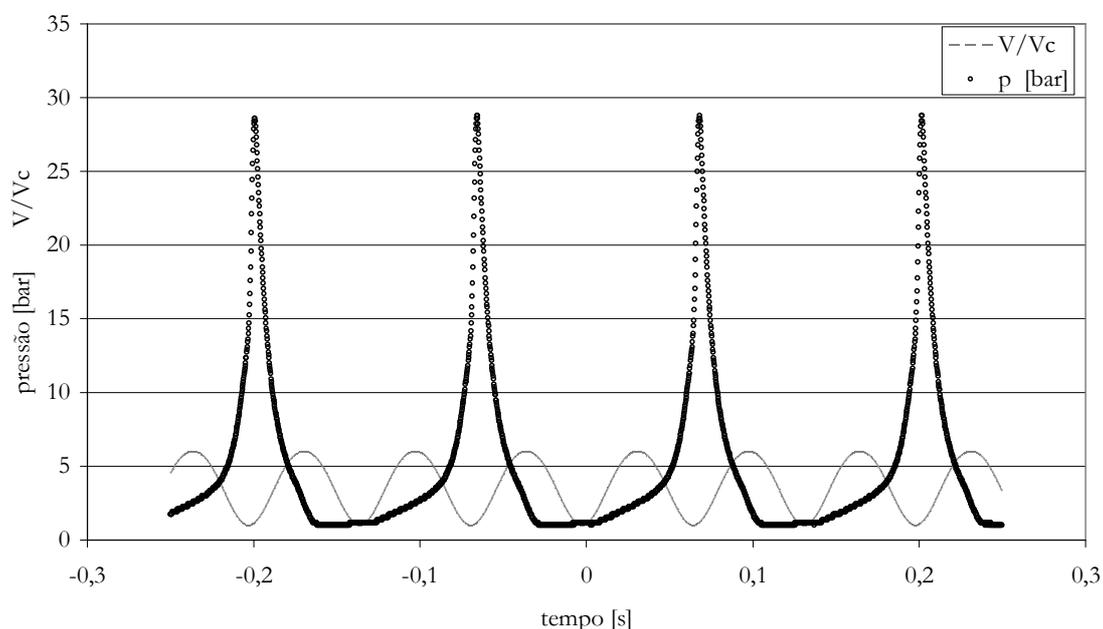


Figura 46: Curvas de pressão experimental e de volume relativo em função do tempo.

O comportamento da curva de pressão é típico de um motor de combustão interna. A pressão varia inversamente proporcional ao volume, enquanto as válvulas estão fechadas. Comparando estes resultados com os resultados para o caso do motor acionado externamente, conforme a Figura 33, a pressão atinge valores de pico maiores e varia de forma mais rápida. A curva de pressão é assimétrica em torno dos picos, existindo um acréscimo de pressão durante a fase de admissão, quando o pistão está descendo e a válvula de admissão está aberta. Este acréscimo é incoerente com o modelo termodinâmico.

A Figura 47 mostra a curva de volume do cilindro e a sua taxa de variação em função do tempo. Os dados desta figura são necessários para a determinação do diagrama $p-V$ e da fração de massa queimada no modelo de diagnose.

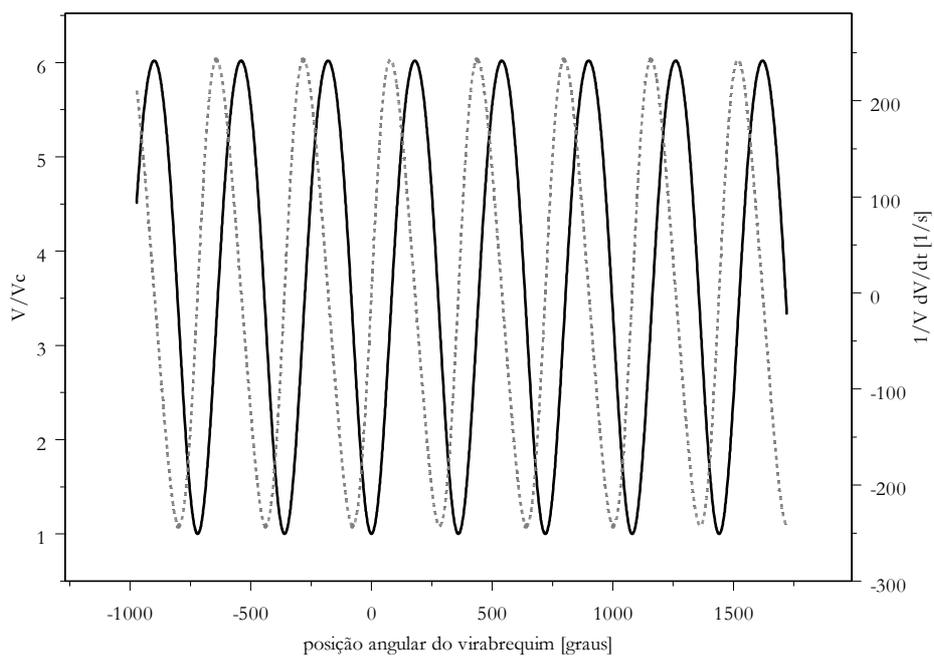


Figura 47: Volume relativo do cilindro V/V_c (linha contínua) e sua taxa de variação $d(V/V_c)/dt$ (linha tracejada).

Com os dados de pressão e volume relativo antes da filtragem de ruído e da compensação de frequência da Figura 46, é possível traçar o diagrama p V mostrado na Figura 48.

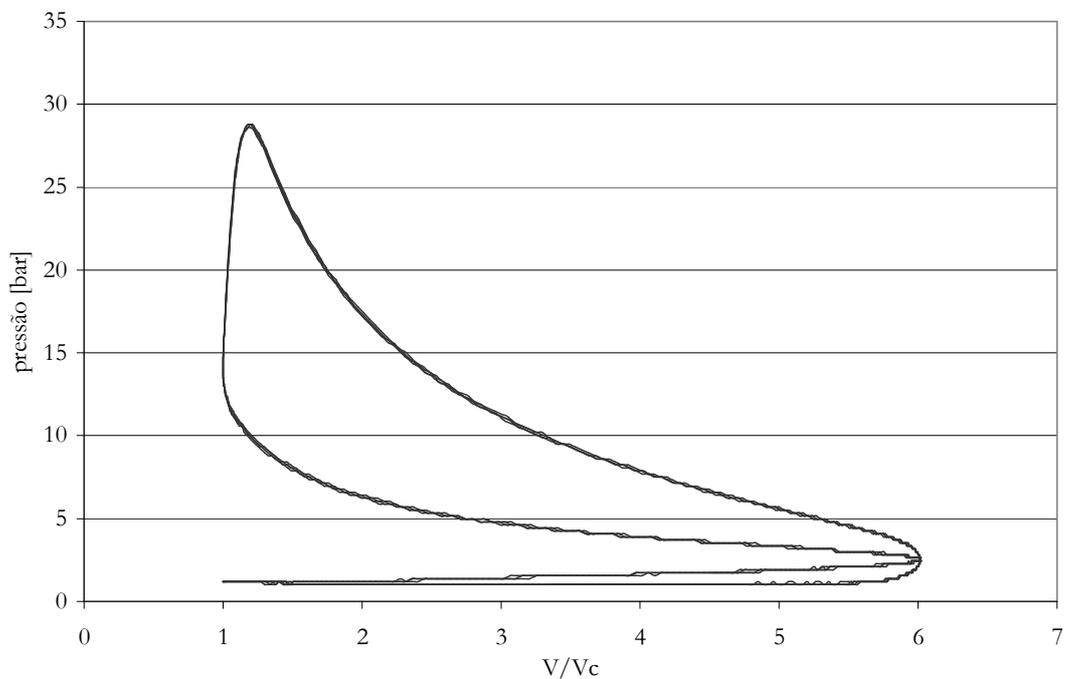


Figura 48: Diagrama p V antes da filtragem de ruído e da compensação de frequência dos dados experimentais.

Observa-se que a pressão no interior do cilindro é aproximadamente constante durante a fase de escapamento, de acordo com o previsto pelos resultados da simulação. No entanto, o comportamento da pressão em função do volume na fase de admissão está incoerente com o conhecido para o Ciclo Otto (vide Figura 1): a pressão aumenta enquanto o pistão se desloca em direção ao PMI. Isto implica num fluxo de massa no sentido inverso ao diferencial de pressão através da válvula. Este fato infringe a Primeira Lei da Termodinâmica e está em desacordo com a equação do escomento compressível de gases através de restrições (vide Equação (15)).

O volume foi determinado em função da posição angular do virabrequim, cuja medida é feita por amostragem através de um sensor de relutância variável. Este fornece um pulso que é correlacionado com a base de tempo do osciloscópio. Esta base de tempo é gerada pela oscilação de um cristal e não está sujeita a distorções da ordem apresentada na medição do diagrama p V. Desta forma, as distorções presentes no diagrama p V devem estar associadas aos dados de pressão e não aos de volume.

Assim, o efeito da distorção ocasionada pelo sensor de pressão deve ser eliminado ou reduzido para permitir a comparação dos dados experimentais com os dados da simulação, permitindo a validação do modelo termodinâmico.

Além disto, a própria aquisição do sinal ocasiona ruído e o erro de truncamento do sinal na digitalização origina uma seqüência de degraus no início da compressão, no final da expansão e também durante os processos de escapamento e admissão.

Filtragem dos ruídos presentes no sinal de pressão

Para a filtragem dos ruídos e degraus, presentes nos dados de pressão experimental ilustrados pela Figura 46 e a correspondente Figura 48, é necessário aplicar o método de mínimos quadrados móveis (MLS - *Moving Least Squares*). Este possibilita a suavização da curva de pressão experimental, minimizando os efeitos do ruído e do truncamento do sinal (degraus) pela digitalização. A aplicação do método MLS consiste em ajustar um polinômio de 3º grau aos 32 pontos mais próximos a um ponto central e, em seguida, derivar o polinômio. Admite-se que o valor da derivada do polinômio seja igual à taxa de variação da pressão e o valor do polinômio igual à pressão, ambos no ponto central.

Após a filtragem dos dados experimentais correspondente à Figura 48 obtém-se o diagrama p V conforme a Figura 49. A forma incoerente do gráfico causada pela limitação da resposta do sensor de pressão em baixa frequência é removida pelo método MLS. Já os degraus resultam suavizados.

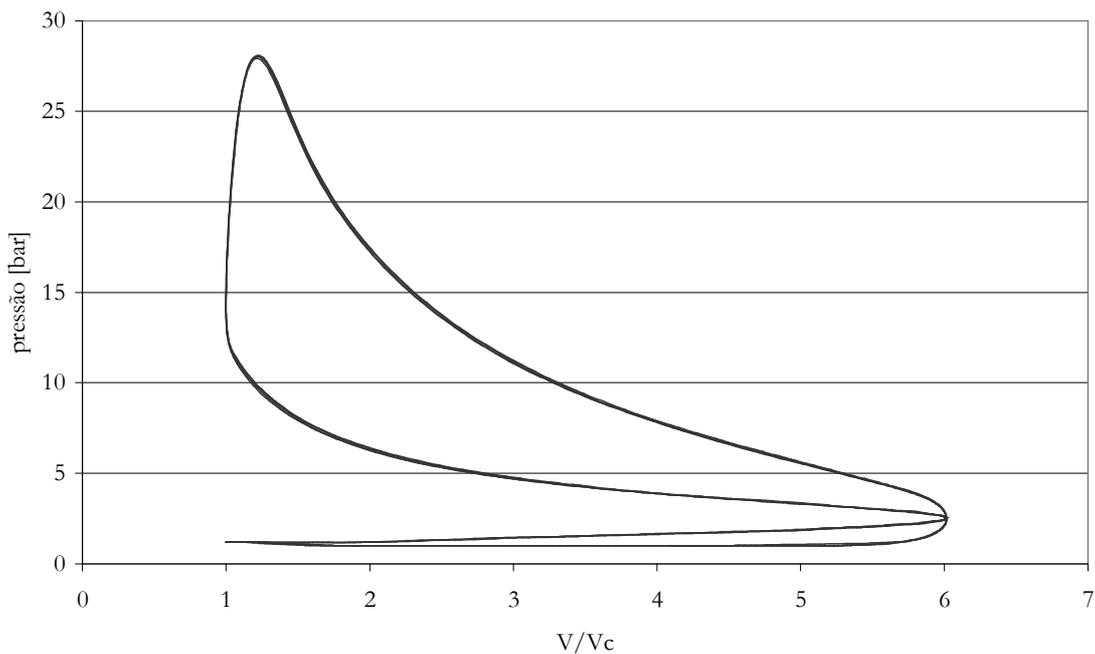


Figura 49: Diagrama p V após a filtragem de ruído com o método MLS.

Uma comparação entre os diagramas p V antes e após a filtragem de ruídos efetuada com o método MLS pode ser vista na Figura 50. A forma do gráfico foi preservada após a aplicação do método, evidenciada pela superposição das curvas, exceto próximo ao pico de pressão. A filtragem de ruídos efetuada pela aplicação do método MLS suaviza os degraus e não afeta significativamente o formato do diagrama p V.

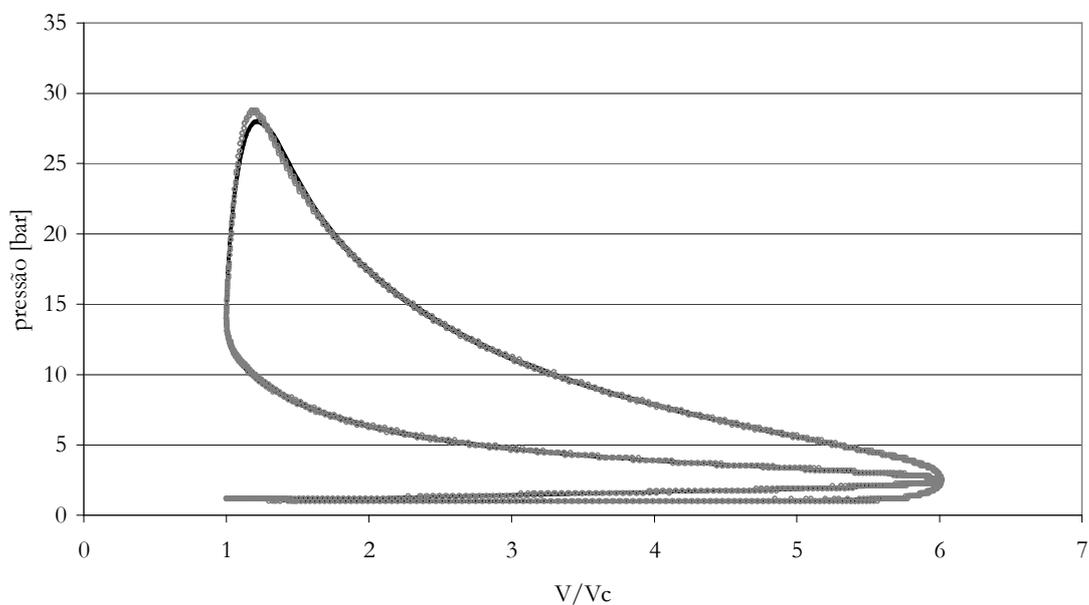


Figura 50: Diagrama p V/V_c traçado a partir dos dados experimentais antes (círculos) e após (linha sólida) a filtragem de ruído pelo método MLS.

Compensação de frequência do sensor de pressão

A incoerência do sinal de pressão durante a fase de admissão foi discutida na Figura 46 e Figura 48. A distorção introduzida pela limitação de resposta de frequência do sensor deve ser compensada para possibilitar a comparação dos dados experimentais com os resultados da simulação.

Para efetuar a compensação de frequência do sensor de pressão é necessário aplicar a transformada de Fourier aos dados da taxa de pressão experimental. A taxa de pressão experimental é obtida pela aplicação do método MLS aos dados de pressão experimental. A estes dados, aplica-se a transformada de Fourier, obtendo-se os coeficientes da Série de Fourier.

Aplicando-se um filtro de resposta inversa aos coeficientes da Série de Fourier, obtêm-se os coeficientes da Série de Fourier que representam os dados de pressão experimental lidos por um sensor ideal. Aplicando a Transformada Inversa de Fourier a estes novos coeficientes, obtêm-se os dados de pressão experimentais corrigidos, conforme teriam sido lidos por um sensor ideal. O filtro de resposta inversa é obtido pela minimização das diferenças entre os dados de pressão experimental corrigidos e os resultados de pressão gerados por simulação. Os dados de pressão experimentais corrigidos podem finalmente ser plotados na forma de um diagrama p V, possibilitando a sua comparação com os resultados da simulação.

A aplicação do método MLS aos dados de pressão experimental permitiu a obtenção da taxa de pressão experimental, conforme mostra a Figura 51.

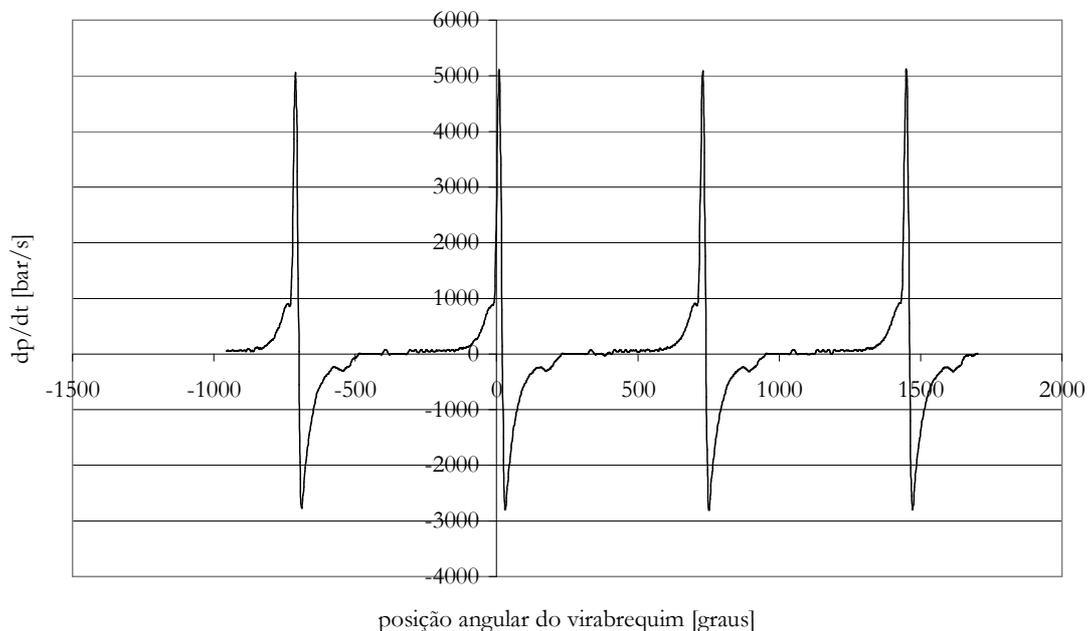


Figura 51: Taxa de variação da pressão experimental em função da posição angular do virabrequim calculada pelo método MLS.

Aplicando-se a transformada de Fourier aos dados da Figura 51, obtém-se os coeficientes da Série de Fourier. A estes coeficientes foi aplicado um filtro de resposta inversa e obtidos os coeficientes da serie de Fourier que representam os dados de pressão experimental lidos por um sensor ideal. Os parâmetros do filtro de resposta inversa foram obtidos pela minimização das diferenças entre os dados de pressão experimental corrigidos e os resultados de pressão gerados por simulação, efetivada pelo método de Newton.

A Figura 52 mostra o diagrama p V após a filtragem e a compensação dos dados experimentais de pressão, obtido com o motor CFR operando com combustível isoctano em condições estequiométricas.

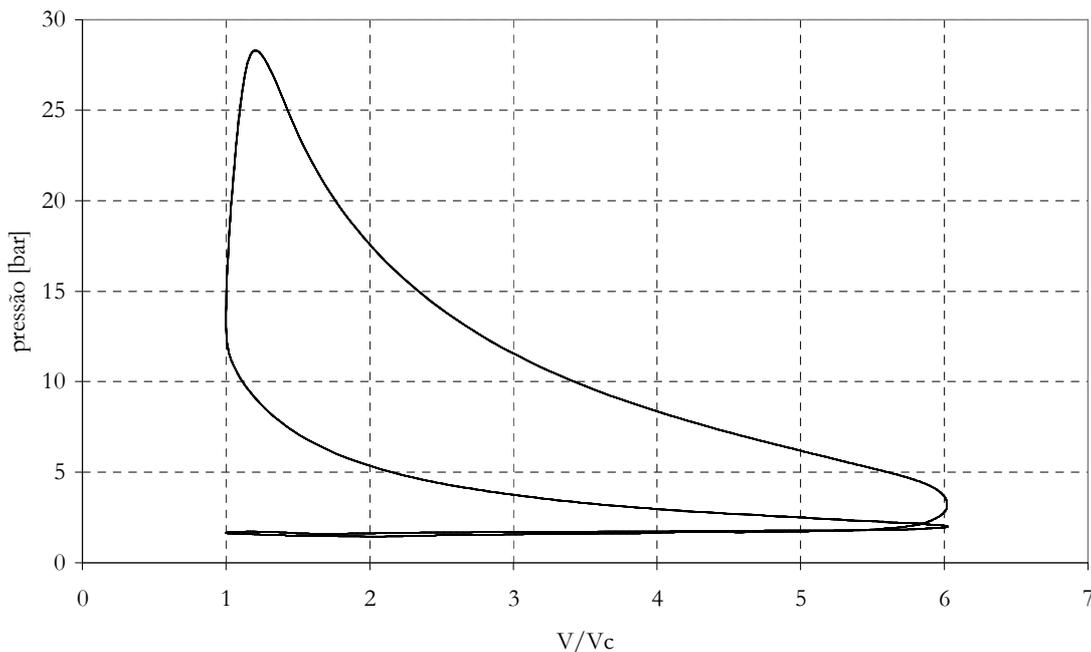


Figura 52: Diagrama p V/V_c após a filtragem de ruído e a compensação de freqüência. O motor CFR operou com combustível isoctano em condições estequiométricas.

Comparando a Figura 49 com a Figura 52, observa-se que o diagrama p V apresenta os degraus mais suaves, além de adquirir um formato coerente com o da Figura 1, não mais contrariando a Primeira Lei da Termodinâmica. Desta comparação pode-se inferir ainda que o sinal distorcido deve-se a limitação de resposta em freqüência do sensor, confirmando a discussão efetuada na análise da Figura 48.

O emprego do filtro mostrou-se eficaz e é uma alternativa encontrada para substituir a calibração do sensor para compensar sua resposta em freqüência. O método aplicado mostrou-se viável para o tratamento de sinais distorcidos pela limitação da resposta em freqüência.

Os dados de pressão experimental após a filtragem de ruído e a compensação de freqüência do sensor de pressão dinâmica foram plotados em função do tempo, conforme mostrado na Figura 53. A comparação com a Figura 46 permite afirmar que a compensação do sinal altera os dados experimentais de pressão ao final dos processos de expansão e de escapamento e durante o de admissão. O diagrama p V esclarece melhor este efeito.

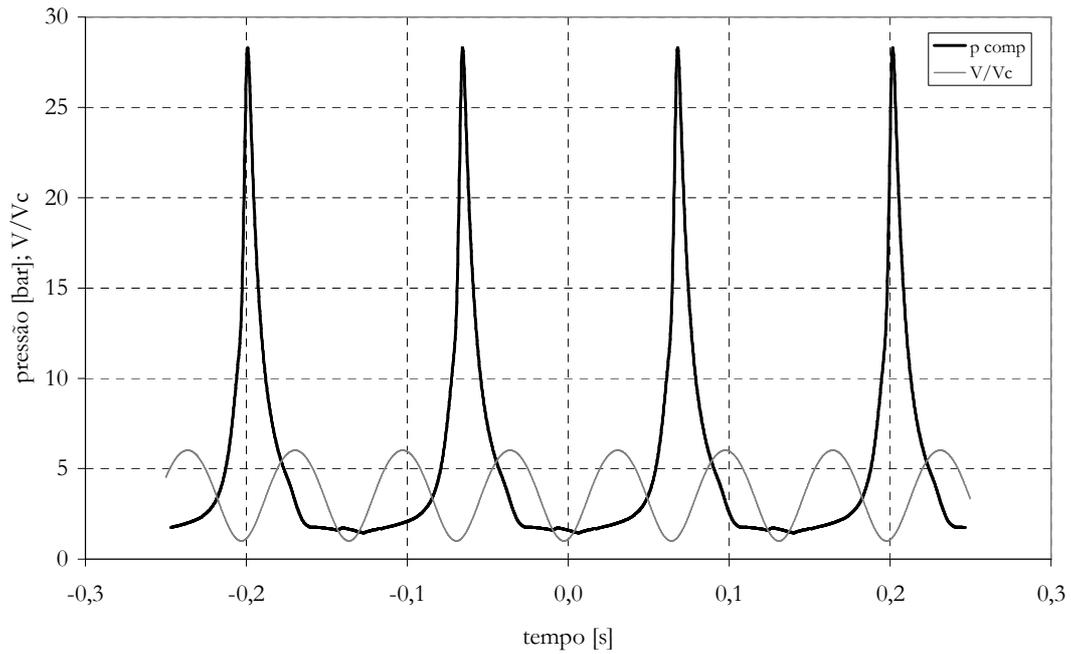


Figura 53: Curvas de volume relativo (cinza) e de pressão experimental (preto), após a filtragem de ruídos e a compensação da resposta do sensor de pressão.

A representação polar dos dados experimentais de pressão antes de depois da compensação de frequência do sensor em função do ângulo do comando de válvulas está mostrado na Figura 54. A representação dos dados na forma de diagrama polar não permitem análises adicionais.

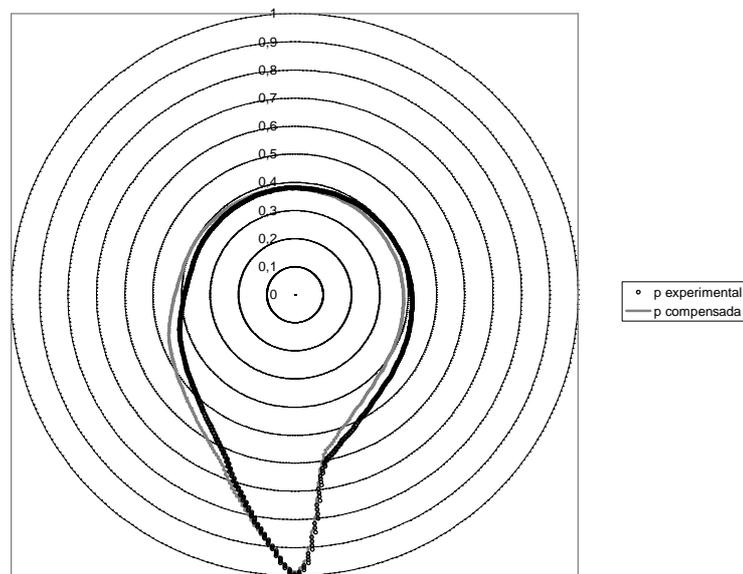


Figura 54: Diagrama polar dos dados de pressão experimentais (preto) e compensados (cinza) em função da posição angular do comando de válvulas no motor CFR.

Os dados de pressão experimentais corrigidos podem finalmente ser comparados com os resultados da simulação.

4.3 Validação dos modelos termodinâmicos

Para a validação dos **dois modelos termodinâmicos, o de combustão e o de admissão, escapamento e compressão**, foram efetuadas diferentes comparações entre os resultados da simulação e os dados experimentais.

A validação dos **dois modelos termodinâmicos** foi efetuada por comparação entre as pressões simuladas e os dados experimentais, tanto para o motor acionado externamente como funcionando normalmente. No primeiro caso foram utilizadas duas taxas de compressão (8:1 e 10:1), e no segundo, uma (8:1). A convergência do método de integração das equações diferenciais dos **dois modelos termodinâmicos** foi verificada nos itens “4.1 Acionamento externo do motor” e “4.2 Funcionamento normal do motor”. Se houvesse divergência, uma ou mais variáveis tenderiam ao infinito e o formato das pressões simuladas se afastaria do formato dos dados experimentais. A observação dos gráficos de pressão ao longo de uma seqüência de quatro ciclos possibilita afirmar que o método converge.

O **modelo termodinâmico de admissão, escapamento e compressão** foi validado através da comparação dos resultados simulados com os dados experimentais para o caso do motor acionado externamente, conforme descrito no item “4.1 Acionamento externo do motor”.

Para verificar a validade do **modelo termodinâmico de combustão** foram feitos testes qualitativos para indicar eventuais incoerências. Foram analisados os diagramas ($p \cdot V$) e as taxas de variação (dp/dt) e ($p/V \cdot dV/dt$) em função do tempo.

O produto $p V/V_c$ foi utilizado para a verificação do funcionamento do **modelo termodinâmico de combustão**. Este produto representa a energia térmica existente em cada posição do virabrequim. Esta energia deve ser proporcional à temperatura média dos gases no interior do cilindro enquanto as válvulas de admissão e escapamento estiverem fechadas. Isto ocorre quando a posição angular do virabrequim estiver entre -165° e 140° . De acordo com a equação de estado dos gases ideais

$$p V = n R T \quad (67)$$

a semelhança do produto pV com a curva de temperatura média só não é perfeita porque o valor de n varia ao longo do processo de combustão. Então, as curvas do produto $p V/V_c$ e T_m em função da posição angular do virabrequim devem ser proporcionais no intervalo em que as válvulas estão fechadas, a menos da variação de n ao longo do processo de combustão.

De acordo com a Equação de Estado dos gases ideais,

$$p V_b = n_b R T_b \quad (68)$$

$$p V_u = (n_a + n_f) R T_u \quad (69)$$

Mas

$$V = V_u + V_b \quad (70)$$

então

$$V = \frac{(n_a + n_f) R T_u}{p} + \frac{n_b R T_b}{p} \quad (71)$$

e

$$p V = R ((n_a + n_f) T_u + n_b T_b) \quad (72)$$

O valor de T_m é dado pela fórmula:

$$T_m = f_b T_b + (1 - f_b) T_u \quad (73)$$

A evolução da temperatura média T_m dos gases no interior do cilindro, em função da posição do virabrequim está mostrada na Figura 55. No início do processo de combustão a fração de massa queimada é nula e a temperatura média é igual à temperatura da zona não queimada. À medida que o processo evolui a temperatura média aumenta, igualando-se finalmente à temperatura dos gases de combustão ao final desta, quando a fração de massa queimada tende a 1.

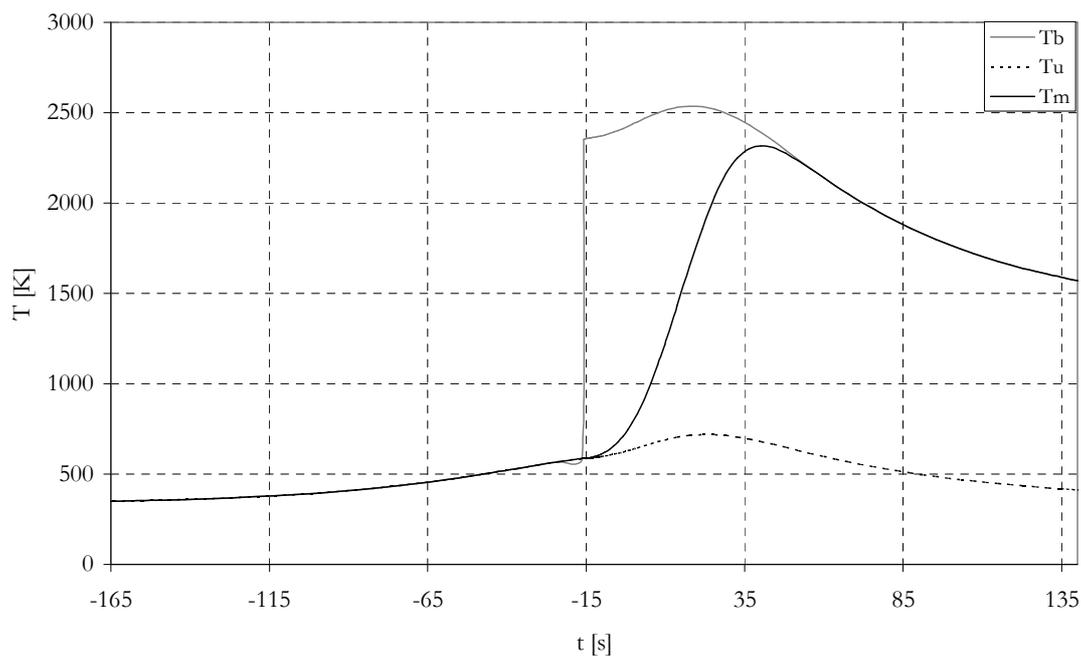


Figura 55: Evolução das temperaturas da zona não queimada T_u , da zona queimada T_b e da temperatura média T_m em função da posição do virabrequim durante o intervalo em que as válvulas estão fechadas.

O produto $p V/V_c$ e a temperatura média simulada foram graficadas em função da posição angular do virabrequim conforme mostra a Figura 56. Verifica-se que o perfil da curva que representa o produto $p V/V_c$ acompanha o perfil da curva de temperatura média T_m . Percebe-se que as curvas não são proporcionais a partir de -18° , quando ocorre a ignição.

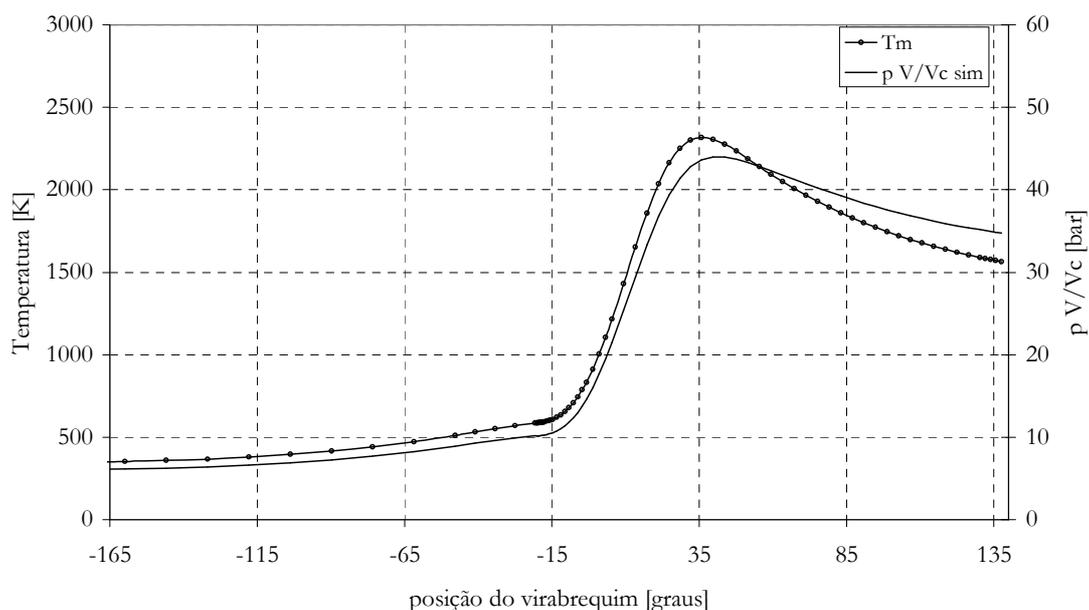


Figura 56: Produto pressão x volume relativo $p V/V_c$ e temperatura média T_m dos gases no interior do cilindro em função da posição angular do virabrequim.

O fato das curvas não serem semelhantes a partir do ponto de ignição pode ser evidenciado pela razão entre elas. A Figura 57 ilustra o comportamento da função $\frac{p V}{V_c T_m}$ em função da posição angular do virabrequim. Se o número de mols n fosse constante, a divisão do produto $p V/V_c$ pela temperatura média T_m deveria resultar num valor constante ao longo de todo o trecho em que as válvulas permanecem fechadas. Como o número de mols varia após a ignição, o resultado desta divisão só é constante no intervalo de -165 a -18° . Durante todo o intervalo de -165° a 140° as válvulas estão fechadas e a massa no interior do cilindro é constante.

O gráfico da Figura 57 é uma reta horizontal durante a compressão e é proporcional ao número de mols durante a combustão, evidenciando a evolução do número de mols. Como os dados deste gráfico foram gerados por simulação e estão de acordo com a descrição efetuada no parágrafo anterior, pode-se afirmar que os modelos termodinâmicos são coerentes.

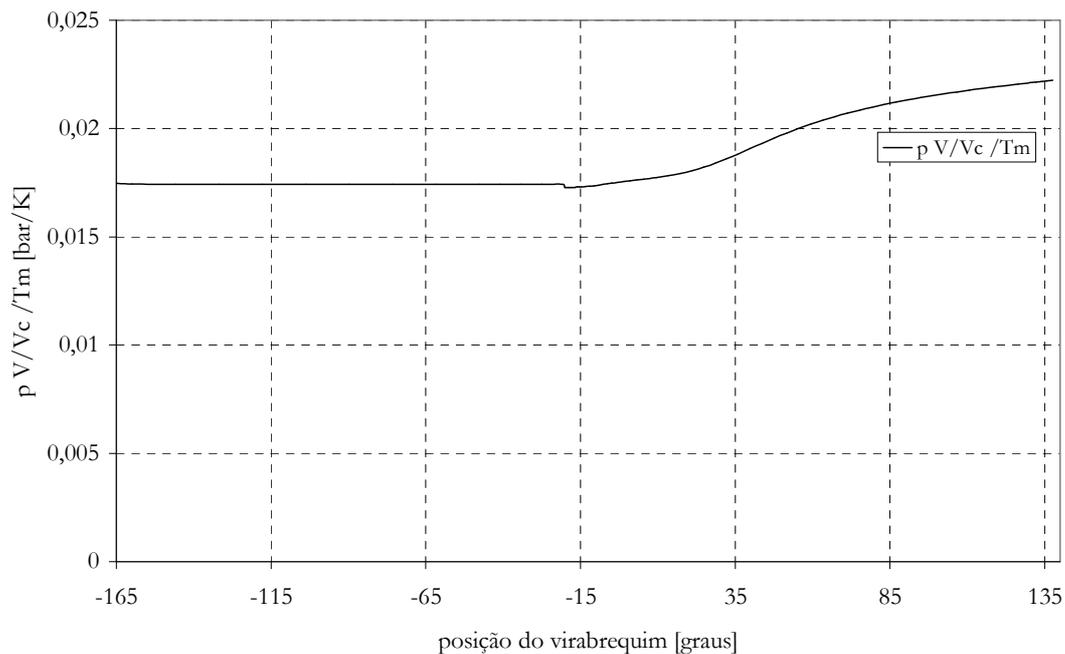


Figura 57: Evolução da função $\frac{p V}{V_c T_m}$ em função da posição do virabrequim enquanto as válvulas permanecem fechadas.

A comparação dos valores simulados com os dados experimentais do produto $p V$ está mostrada na Figura 58. O formato da curva $p V$ experimental é semelhante ao previsto por simulação desde o fechamento das válvulas até a ignição, a partir da qual aumenta mais rapidamente e atinge um patamar após o PMS, enquanto o valor simulado continua a aumentar. As duas curvas tornam a se cruzar próximo aos 80° APMS, quando o valor de ambas diminui à medida que o pistão se aproxima do PMI.

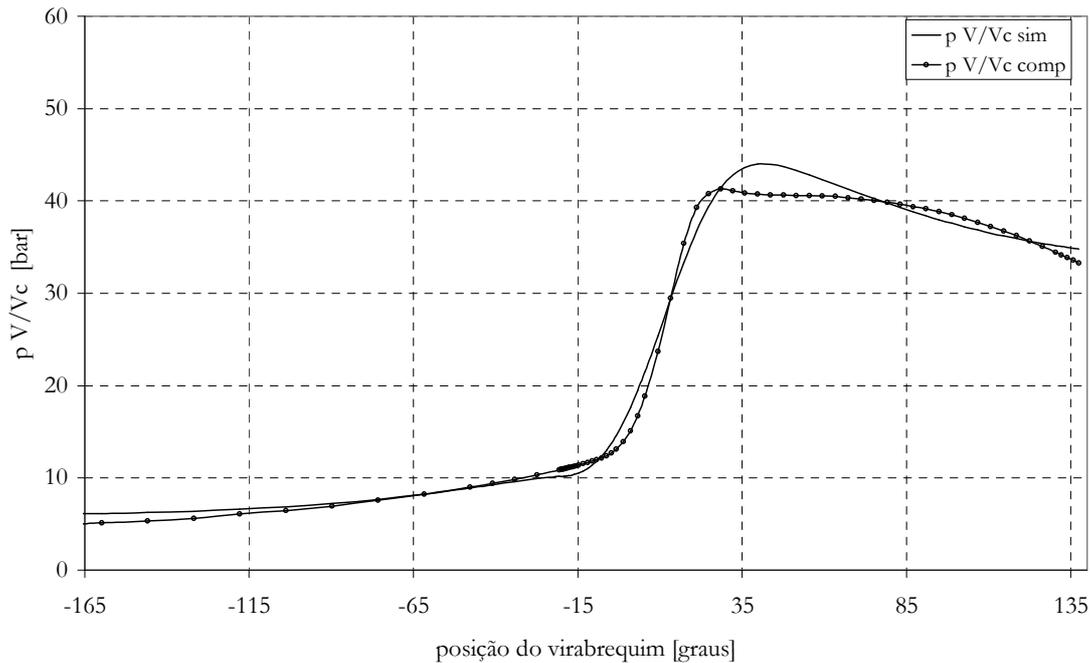


Figura 58: Comparação entre os valores simulados $p V/V_c$ sim e os dados experimentais $p V/V_c$ comp do produto $p V/V_c$, em função da posição do virabrequim.

Para verificar se o **modelo termodinâmico de combustão** está coerente, foi efetuada a comparação da taxa de variação da pressão (dp/dt) com a taxa da variação do volume do cilindro multiplicada pela razão $n p/V$. Estas duas taxas representam a variação da pressão no tempo e devem coincidir no intervalo em que as válvulas estão fechadas. Nestas condições a expansão pode ser considerada politrópica, e descrita pela seguinte equação:

$$p V^n = \text{constante} \quad (74)$$

cuja diferencial total é

$$V^n dp + n p V^{n-1} dV = 0 \quad (75)$$

Portanto

$$V^n \frac{dp}{dt} + n p V^{n-1} \frac{dV}{dt} = 0 \quad (76)$$

e

$$\frac{dp}{dt} = -n \frac{p}{V} \frac{dV}{dt} \quad (77)$$

O expoente politrópico n se aproxima de 1,33 durante a compressão e de 1,30 durante a expansão (Heywood, 1989). Como este expoente varia pouco, espera-se que o formato das curvas $\frac{dp}{dt}$ e $-\frac{p}{V} \frac{dV}{dt}$ seja semelhante enquanto as válvulas estiverem fechadas e não houver reações químicas. Isto ocorre desde o início do processo de compressão até a ignição e desde o final do processo de combustão até a abertura da válvula de escapamento.

Durante a combustão há liberação de energia térmica e o processo não pode ser considerado politrópico; portanto, a equação $\frac{dp}{dt} = -n \frac{p}{V} \frac{dV}{dt}$ não é válida e as curvas não devem ser semelhantes.

As curvas da taxa de variação da pressão (dp/dt) e da função ($p/V \cdot dV/dt$) em função da posição angular do virabrequim estão apresentadas na Figura 59. Verifica-se que o formato destas curvas é semelhante no intervalo em que as válvulas estão fechadas e não ocorrem reações químicas, mas difere significativamente durante a combustão. Nota-se que as duas curvas se superpõem durante a compressão e no final da expansão, quando a combustão já está completa; o que está de acordo com o modelo termodinâmico.

As curvas do gráfico da Figura 59 são semelhantes no intervalo de -165 a -18° e a partir de 60° até 140° . Evidenciando o intervalo onde ocorre a combustão. Como este gráfico compara dados experimentais com resultados de simulação e estão de acordo com a descrição efetuada no parágrafo anterior, pode-se afirmar que os modelos termodinâmicos são coerentes.

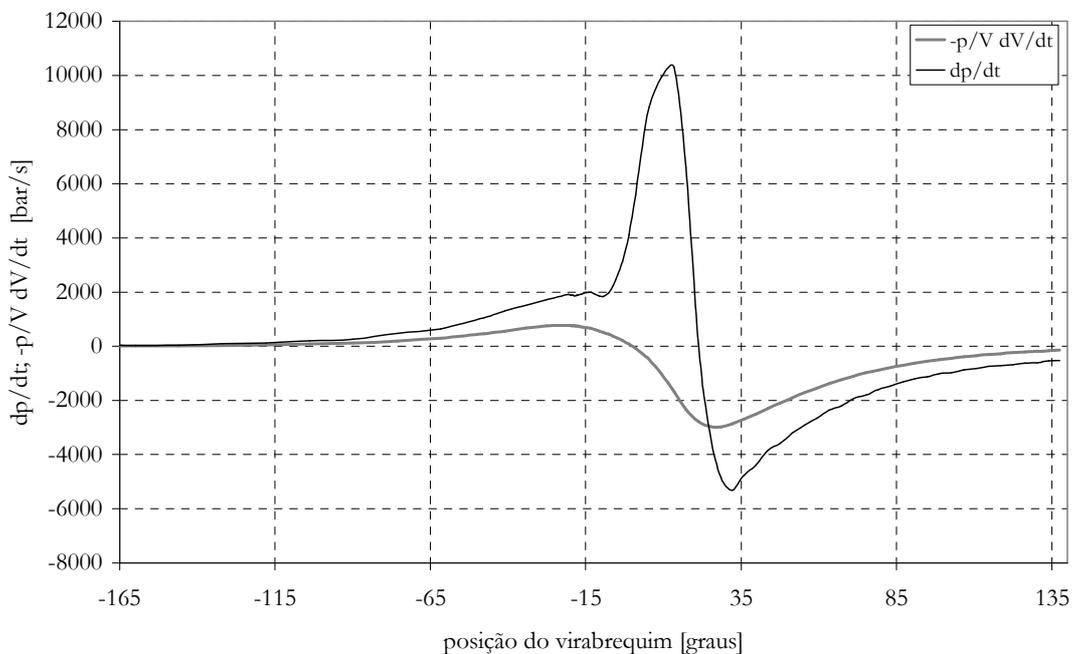


Figura 59: Comparação entre as curvas $-\frac{p}{V} \frac{dV}{dt}$ (cinza) e $\frac{dp}{dt}$ (preto), em função da posição angular do virabrequim. A diferença entre as curvas no intervalo em que as válvulas de admissão e escapamento estão fechadas deve-se aos efeitos da combustão.

4.4 Validação do modelo do ciclo Otto completo

Para a validação do modelo do ciclo Otto completo, os dois modelos termodinâmicos foram integrados sucessivamente ao longo de quatro ciclos completos. As condições iniciais da integração do primeiro modelo são arbitradas e, a partir daí, as condições iniciais de cada modelo são igualadas às condições finais do modelo anterior.

A Figura 60 mostra os resultados da simulação de quatro ciclos Otto completos sucessivos do motor CFR, operando com combustível isoctano em condições estequiométricas, à taxa de compressão de 6,01:1. A pressão ao longo do primeiro ciclo é maior, porque não existem gases residuais no interior do cilindro no início da operação do motor. Note-se a semelhança entre as Figuras 53 e a Figura 60.

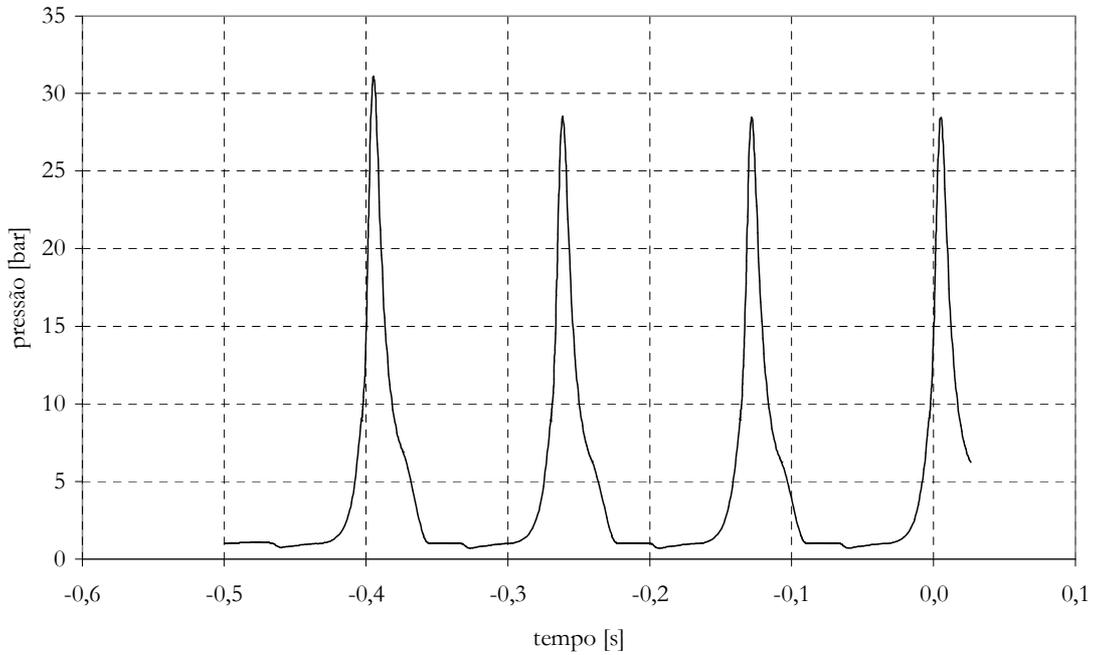


Figura 60: Pressão dos gases no interior do cilindro do motor CFR simulada ao longo de quatro ciclos Otto completos sucessivos.

A verificação da validade do modelo por comparação com os dados experimentais, pode ser observada na Figura 61. Ela compara os resultados da simulação com os dados da pressão experimental no interior do cilindro do motor CFR ao longo de quatro ciclos Otto completos.

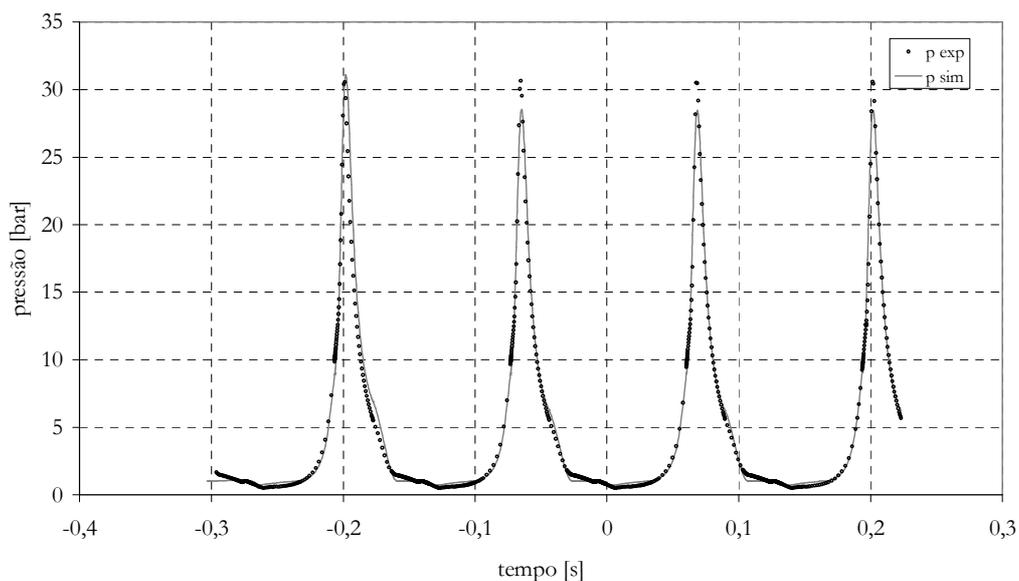


Figura 61: Comparação entre os resultados da simulação e os dados da pressão experimental no interior do cilindro do motor CFR ao longo de quatro ciclos Otto completos.

Os resultados da simulação utilizados para traçar a Figura 60 foram plotados na forma de diagrama p V , conforme mostram as Figuras 62 e 63. A área correspondente ao diagrama p V do primeiro ciclo é maior que as áreas correspondentes aos demais. Isto se deve à maior pressão no interior do cilindro ao longo do primeiro ciclo, ocasionada pela inexistência de gases residuais no seu interior no início da simulação. A partir do segundo ciclo, os diagramas se superpõem.

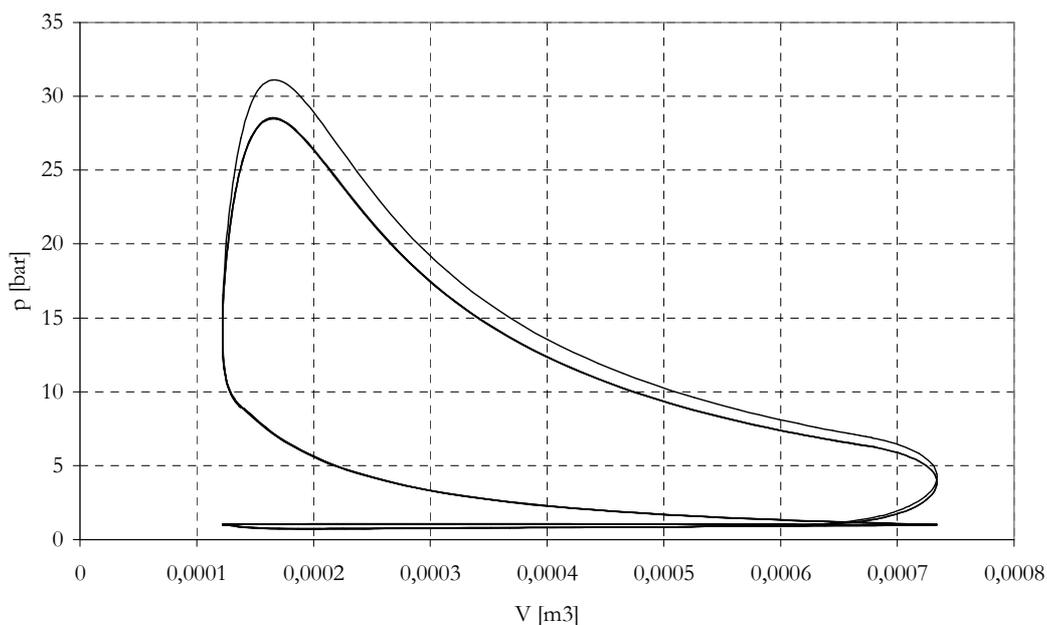


Figura 62: Diagrama p V do motor CFR ao longo de quatro ciclos Otto completos sucessivos.

A partir do quarto ciclo os resultados simulados se estabilizam. Esta condição de regime permanente é mostrada na Figura 63, a qual se assemelha ao ciclo representado pelos dados experimentais mostrados na Figura 52.

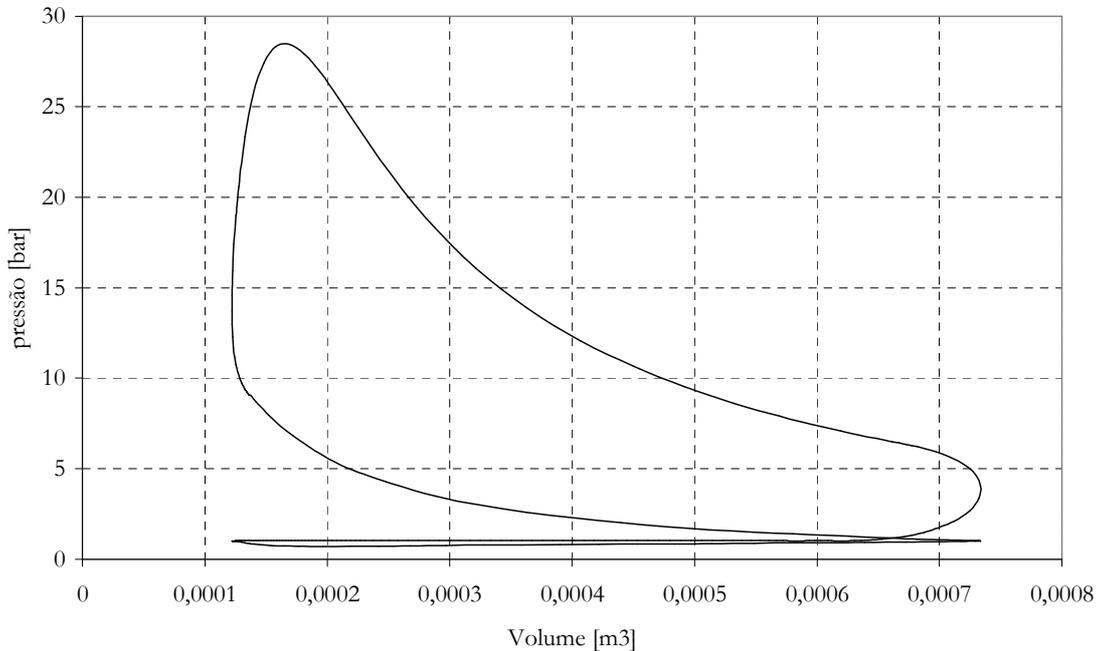


Figura 63: Diagrama p V do motor CFR ao longo do quarto ciclo Otto completo (comparar com a Figura 52).

A superposição do diagrama p V simulado (Figura 62) com o obtido a partir dos dados experimentais (Figura 52) está representada na Figura 64. A curva experimental representada é a média de 128 ciclos do motor CFR funcionando com uma mistura estequiométrica de isoctano e ar atmosférico. Os modelos adotados para descrever os trechos do diagrama foram o modelo de escapamento, admissão e compressão e o de combustão.

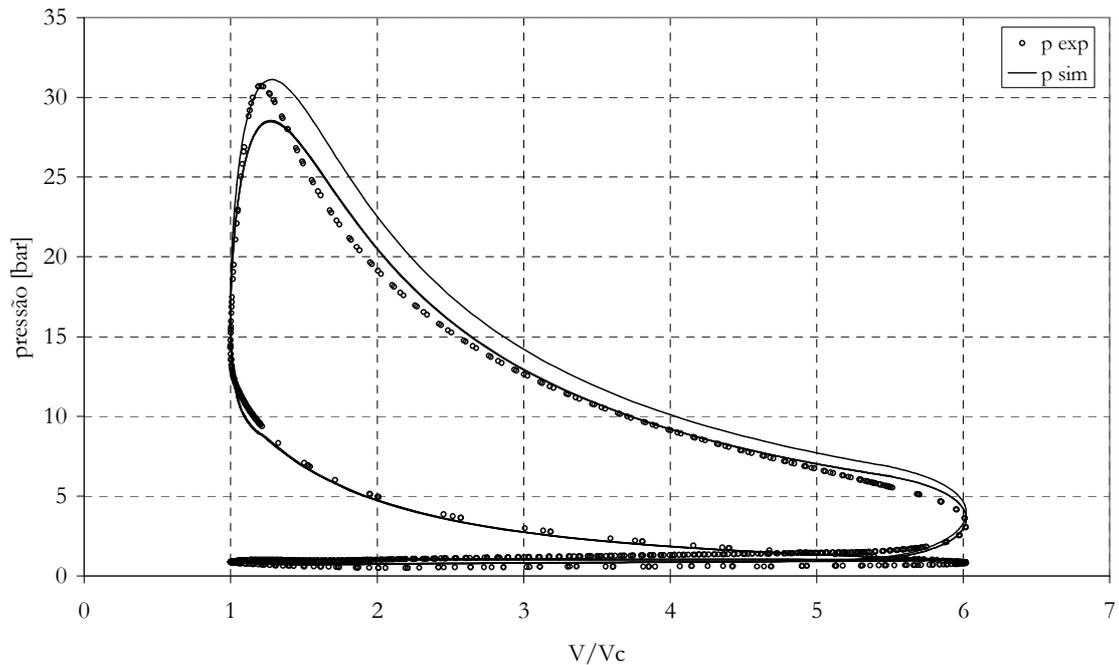


Figura 64: Comparação entre os diagramas p V simulado (linha) e experimental (círculos) do motor CFR ao longo de quatro ciclo Otto completos.

De uma forma geral existe boa concordância entre os diagramas ao longo da maior parte da área do gráfico, validando o modelo termodinâmico grosseiramente.

O modelo termodinâmico reproduz os dados experimentais com exatidão durante os **trechos do diagrama de escapamento a partir do PMI, de admissão e do início da fase de compressão até a ignição**. Este fato confirma que o ajuste efetuado pela compensação de frequência do sensor foi capaz de fazer coincidir os diagramas neste trecho e que o modelo de escapamento, admissão e compressão apresenta uma boa exatidão.

A pressão experimental e a simulada apresentam diferenças no **trecho do diagrama correspondente a duração da combustão**. A pressão experimental começa a aumentar logo após a ignição, atinge um pico mais elevado e diminui mais rapidamente do que a pressão simulada.

Após a ignição o modelo termodinâmico utilizado para a simulação passa a ser o de combustão, sendo utilizado até a abertura da válvula de escapamento.

Como a compensação de frequência do sensor não foi capaz de fazer coincidir os diagramas, mas foi verificado que durante as fases de escapamento, de admissão e do início da fase de compressão até a ignição (uso do modelo de escapamento, de admissão e compressão) a compensação foi efetiva, então a possibilidade de erro devido ao sensor é descartada. A compensação de frequência só é capaz de ajustar os erros introduzidos pela distorção do sinal do sensor de pressão. Resta analisar a possibilidade de erro introduzido pelo modelo de combustão.

Os três parâmetros da Função de Wiebe fazem parte das equações diferenciais que descrevem o modelo de combustão. Eles determinam a velocidade de queima e não foram ajustados aos dados experimentais. Isto só seria possível se os coeficientes do modelo termodinâmico de combustão também tivessem sido incluídos no ajuste pelo método de Newton. No entanto, o solver utilizado só é capaz de ajustar parâmetros que permanecem constantes durante o intervalo de integração. Como os parâmetros da Função de Wiebe variam durante este intervalo, então o solver não é capaz de ajustar os parâmetros do modelo termodinâmico.

O modelo de combustão descreve com exatidão o **trecho correspondente a expansão dos gases queimados até a abertura da válvula de escapamento.**

No **trecho desde a abertura da válvula de escapamento até o PMI** a pressão experimental diminui mais rapidamente do que o previsto pelo modelo de escapamento, admissão e compressão. A não concordância pode ser devida a um erro no cálculo da vazão da válvula de escapamento ou à transferência de erro introduzida pela compensação de frequência do sensor. Não existe como saber a causa sem efetuar o ajuste dos parâmetros do modelo termodinâmico.

A medição da temperatura no interior do cilindro não foi efetuada. No entanto, a integração dos modelos termodinâmicos fornece seu valor em função do tempo. As temperaturas dos gases de combustão e da mistura fresca no interior do cilindro do motor CFR, simuladas ao longo de quatro ciclos Otto completos sucessivos, são mostradas na Figura 65.

Durante a combustão, a temperatura média dos gases no interior do cilindro pode ser calculada a partir das temperaturas da mistura fresca, dos gases de combustão e da fração de massa queimada. Durante a admissão e compressão a fração de massa queimada é nula, e a temperatura média no cilindro é igual à temperatura da mistura não queimada. Após o final da combustão e durante o escapamento, a fração de massa queimada é igual a 1, e a temperatura média dos gases no interior do cilindro é igual à temperatura dos gases queimados.

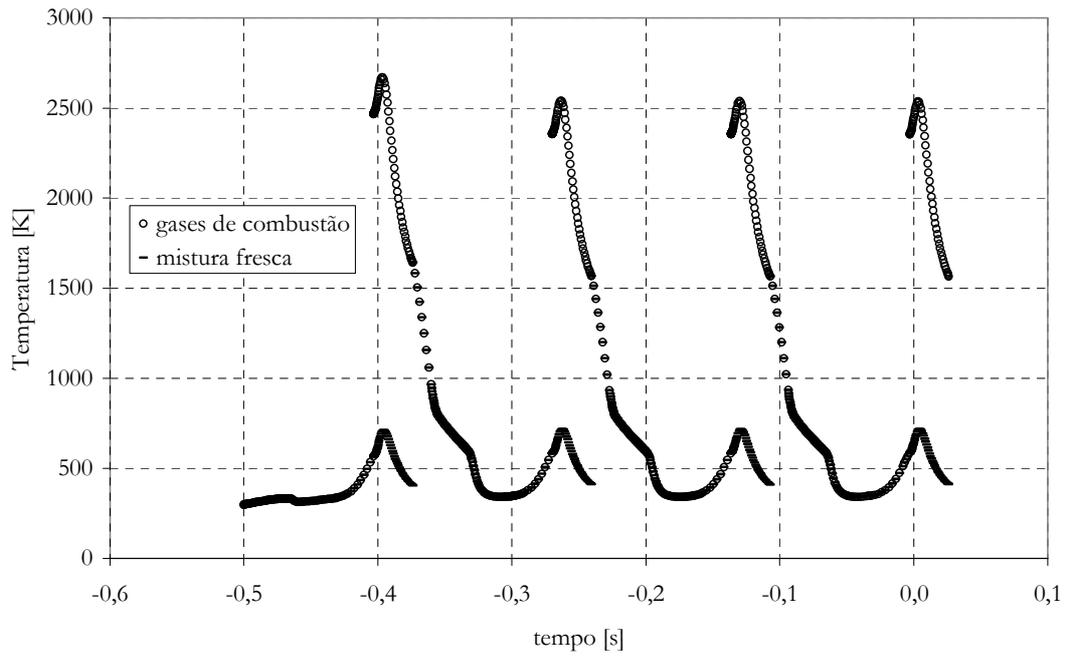


Figura 65: Temperaturas dos gases de combustão e da mistura fresca no interior do cilindro do motor CFR, simuladas ao longo de quatro ciclos Otto completos sucessivos.

Capítulo 5

Conclusões e sugestões de continuidade

5.1 Conclusões

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo termodinâmico que permite simular os processos que compõem o ciclo de trabalho dos motores de ignição por centelha, incluindo os processos de compressão, combustão-expansão, exaustão e admissão.

A principal motivação deste trabalho foi alcançada: foi possível concatenar os efeitos da variação contínua dos parâmetros do combustível sobre o funcionamento de um motor CFR e desenvolver um programa genérico que possibilita o acréscimo de mais rotinas e funções abertas, paramétricas e modulares, e que descreve o diagrama p V do ciclo Otto numericamente.

O modelo termodinâmico paramétrico desenvolvido consiste de um sistema de equações diferenciais baseado nos princípios de conservação de massa e energia, na composição de equilíbrio dos produtos de combustão determinada pela rotina de Borman, na taxa de transferência de calor entre os gases e as paredes do cilindro calculada pela equação de Woschni, na taxa de queima do combustível calculada pela fórmula de Wiebe e nas propriedades termodinâmicas dos fluidos de trabalho determinadas pela equação de Shomate, e no escoamento através das válvulas de admissão e exaustão calculado pela equação do escoamento compressível de gases através de uma restrição.

O sistema de equações diferenciais possibilitou a determinação das taxas dp/dt , dT_u/dt , dT_b/dt , cuja integração numérica permitiu o cálculo de p , T_u , T_b . Com estes dados foi traçado o diagrama p V para o ciclo Otto completo. Verificou-se que a hipótese de movimento circular uniforme do motor CFR foi satisfeita. A integração do modelo foi possível ao longo de vários ciclos do motor, sem que houvesse divergência do método numérico de integração das equações diferenciais. O modelo proposto permitiu o traçado de diagramas p V semelhantes aos obtidos experimentalmente, quer o motor esteja queimando combustível ou acionado por motor elétrico, sustentando a conclusão de que não há incoerências físicas no modelo de simulação.

Para validar o modelo termodinâmico desenvolvido e comparar os resultados das simulações com os dados obtidos experimentalmente, foi desenvolvido um banco de

ensaios utilizando um motor CFR de ignição por centelha, instrumentado de forma a permitir a aquisição de dados. O perfil de abertura das válvulas de admissão e escapamento e os seus coeficientes de descarga foram determinados experimentalmente. Os ensaios foram realizados nas condições de acionamento externo e de operação normal do motor, medindo-se a pressão e a posição do virabrequim. Os diagramas p V para estas duas condições foram determinados. O tratamento dos sinais incluiu a filtragem dos ruídos e a compensação da resposta em frequência do sensor utilizado.

O tratamento de dados proposto foi capaz de reduzir o ruído presente nos dados experimentais, tornando possível a determinação da taxa de variação da pressão. A resposta de frequência do sensor alterou significativamente os dados experimentais de pressão. O emprego de um filtro de resposta inversa à do sensor mostrou-se eficaz e é uma alternativa encontrada para substituir a calibração do sensor para compensar sua resposta em frequência, mostrando-se viável para o tratamento de sinais distorcidos pela limitação da resposta em frequência.

Os resultados das simulações foram comparados com os dados experimentais. Existe uma boa concordância no trecho do diagrama p V desde o PMI até a ignição, confirmando que o ajuste efetuado pela compensação de frequência do sensor foi eficaz. No trecho correspondente à duração da combustão, existem diferenças entre a pressão experimental e a simulada, devido ao efeito variável dos parâmetros da Função de Wiebe sobre a pressão e a não capacidade do solver utilizado em ajustar estes parâmetros. O modelo de combustão descreve com exatidão o trecho desde a expansão dos gases queimados até a abertura da válvula de escapamento. No trecho desde a abertura da válvula de escapamento até o PMI a pressão experimental diminui mais rapidamente do que o previsto pelo modelo de escapamento, admissão e compressão. Esta diferença deve-se ao fato dos parâmetros do modelo termodinâmico não terem sido ajustados devido à incapacidade do solver utilizado.

As maiores diferenças entre o diagrama p V experimental e o simulado estão na região próxima ao pico de pressão, devidas à diferença entre os parâmetros das funções de Wiebe e de Woschni adotados na simulação e a realidade.

5.2 Sugestões de continuidade

Em função dos resultados obtidos são sugeridos os seguintes itens como continuidade deste trabalho:

- Aumentar a profundidade de registro do sistema de aquisição para permitir a amostragem de mais pontos a cada ensaio e aumentar o espectro de frequência adquirida, melhorar a resolução aumentando o número de bits do conversor A/D do osciloscópio, e melhorar a resposta de frequência do sensor de pressão escolhendo outro de melhor desempenho;
- Desenvolver uma rotina para automatizar o cálculo dos coeficientes de Fourier do sinal do sensor de pressão;
- Desenvolver uma rotina para automatizar o ajuste dos parâmetros das funções de Wiebe e Woschni, para facilitar a avaliação da velocidade de queima dos combustíveis e das trocas de calor entre os gases e as paredes do cilindro. Este é um desenvolvimento mais complexo do que o ajuste dos parâmetros do sensor de

pressão, porque os parâmetros a serem ajustados fazem parte das equações diferenciais do modelo e estão sob o sinal de integração; o ajuste dos parâmetros abaixo do sinal de integral exige uma nova simulação do modelo a cada passo de iteração do método de Newton-Raphson utilizado para identificá-los (ao contrário dos parâmetros que estão fora do sinal de integral e que, portanto, podem ser identificados mais facilmente);

- Desenvolver um modelo para a velocidade de combustão turbulenta a partir da geometria da frente de chama e das paredes do cilindro, e ajustá-lo aos dados experimentais;
- Verificar a adequação do modelo de transferência de calor, comparando os valores de temperatura no interior do cilindro determinados pelo modelo com valores medidos experimentalmente;
- Verificar a adequação do modelo de enchimento e esvaziamento do cilindro, instalando um sensor de vazão no coletor de admissão e comparando os valores determinados pelo modelo com valores experimentais.

Referências Bibliográficas

Annand W. J. D.: "Heat transfer in cylinders of reciprocating internal combustion engines". Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, 177(36):973-990, 1963.

Annand, W.J.D.; Roe, G.E.: "Gas Flow in the Internal Combustion Engine". Haessner Publishing, Newfoundland. N.J., 1974.

Bella, Gino; Buttari Alfredo, De Maio, Alessandro; Del Citto, Francesco; Filippone, Salvatore; and Fabiano Gasperini: "FAST-EVP: An engine simulation tool". Proceedings of the First International Conference on High Performance Computing and Communications, HPCC 2005, Sorrento, Italy, September 2005. Faculty of Engineering, Università di Roma "Tor Vergata", Viale del Politecnico, 1-00133, Rome, Italy. NUMIDIA srl, Rome, Italy.

Benson, R. S.; Annand, W. J. D.; Baruah, P. C.: "A simulation model including intake and exhaust systems for a single cylinder four-stroke cycle spark ignition engine". Int. J. mech. Sci. Pergamon. Press, 1975, vol. 17, pp. 97-124

Borman, G. L.: "Reciprocating engine combustion research needs". SAE Transactions, (850398):101-112, 1985.

Campbell A. S.: "Thermodynamic Analysis of Combustion Engines". Robert E. Krieger Publishing Company, Inc., Malabar, Florida, 1985.

Ghojel, J. I.: "Review of the development and applications of the Wiebe function: a tribute to the contribution of Ivan Wiebe to engine research". International Journal of Engine Research, online publication, 2010.
<http://journals.pepublishing.com/content/W5135P3J01257086>.

Guibet, J. C.; Martin, Brigitte.: "Carburants et Moteurs". Éditions Technip, Paris, 1975.

Hershey, R. L.; Eberhardt, J. E.; Hottel, H. C.: "Thermodynamic properties of the working fluid in internal combustion engines". SAE Transactions, pages 409-424, 1936.

Heywood, J. B.: "Internal Combustion Engine Fundamentals". McGraw-Hill, 1989.

Jeschke, J.: "Konzeption und Erprobung eines zylinderdruckbasierten Motormanagements für PKW-Dieselmotoren", tese de Doutorado da Faculdade de Engenharia da Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, 2002-11-08.

Krieger, R. B.; Borman G. L.: "The computation of apparent heat release for internal combustion engines". ASME paper, (66-WA/DGP-4), 1966.

Lapuerta, M.; Ballesteros R.; Agudelo J.R.: "Effect of the gas state equation on the thermodynamic diagnosis of diesel combustion". Applied Thermal Engineering, V. 26, Issues 14-15, pp. 1492-1499, October 2006.

Levin, D.: "The Approximation Power of Moving Least-Squares". Mathematics of Computation, Volume 67, Number 224, Pages 1517-1531, October 1998.

Loeb, Leonard B.: "The Kinetic Theory of Gases", unabridged republication of the 1961 Dover edition, which reprinted the second edition, published by McGraw-Hill in 1934. Dover Publications, Inc., 2004.

Mendera, K. Z.: "Burn rate profiles for Compression Ignition engine model". Journal of KONES Internal Combustion Engines 2005, vol. 12, 1-2. Czstochowa University of Technology, Institute of Internal Combustion Engines and Control Engineering

Nag, P. K.: "Engineering Thermodynamics", 3rd. Edition. Tata McGraw-Hill, 2005

Olikara C.; Borman G. L.: "A computer program for calculating properties of equilibrium combustion products with some applications to I. C. engines". SAE paper, (750468), 1975.

Ortenzi, Fernando: "Un modello de simulazione di un motore ad accensione comandata a 4 tempi". RTZ Soft, 2004.

Powell H. N.: "Applications of an enthalpy-fuel/air ratio diagram to First Law combustion problems". Transactions of the ASME, pages 1129-1138, July 1957.

Rao, Mothiki S. Prakash: "Pulse and digital circuits". Tata McGraw-Hill, New Delhi, 2006.

Shiao, Y; Moskwa, J. J.: "Cylinder Pressure and Combustion Heat Release Estimation for SI Engine Diagnostics Using Nonlinear Sliding Observers". IEEE Transactions on Control Systems Technology. Vol. 3, No. 1, page 70, March 1995.

Stiesch, Gunnar: "Modelling engine spray and combustion processes". Springer, 2003.

Stiesch, Gunnar: "Simulating combustion". Springer, 2006.

Taylor, C. F.: "The Internal-Combustion Engine in Theory and Practice", volume 2. The M.I.T. Press, second edition, 1985.

Velásquez, J. A.: "Simulação dos Processos e Análise Exergética do Motor de Ciclo Diesel". Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica, Departamento de Energia. Campinas, 1993.

Waukesha Engine Division, Dresser Industries Inc.: "Bulletin No. 1163, The Waukesha CFR Fuel Research Engine: An International Historic Mechanical Engineering Landmark". Waukesha, Wisconsin, June, 1980

Way R. J. B.: "Methods for determination of composition and thermodynamic properties of combustion products for internal combustion engine calculations". Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, 190(60/76):687{697, 1977.

Wlodarczyk, Marek T., "Long-Life Fiber-Optic Pressure Sensors for Harsh Environment Applications". 9th Trade Fair and Conference Sensor99, Maio de 1999a, Nuremberg, Alemanha.

Wlodarczyk, Marek T.: "Embedded Fiber-Optic Combustion Pressure Sensor for Automotive Engine Controls". 1998 FISITA World Automotive Congress, 27 de setembro a 1º de outubro de 1998a, Paris, França.

Wlodarczyk, Marek T.: "In-Cylinder Fiber-Optic Pressure Sensor for Monitoring and Control of Diesel Engines". SAE Future Transportation and Technology Conference, 11 a 13 de agosto de 1998b, Costa Mesa, California, E.U.A.

Wlodarczyk, Marek T.: "Long-Life Fiber-Optic Pressure Sensors for Reciprocating Machinery Monitoring". 53rd Meeting of the Society for Machinery Failure Prevention Technology, Virginia Beach, Virginia, E.U.A., 19 a 22 de abril de 1999b.

Wood, C.D.: "Research needs for diesel engines". SAE Transactions, (881178):6.1392-6.1401, 1988.

Woschni, G: "Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine", SAE paper 670391, SAE Trans, vol. 76, 1967

Zacharias F.: "Analytical representation of the thermodynamic properties of combustion gases". SAE paper, (670930), 1967.

Anexo A

Modelo de escapamento, admissão e compressão

```
function [dy] = exh_adm_comp2(t, y)

% function [y,dy,A,V,dV,p,dn_int,dn_exh] = exh_adm_comp(t, y)

% As fórmulas abaixo foram copiadas de g:\mestrado\simulação de
motores\pendrive\Annand ciclo pg105

% Verificada em 16abr2009 as 11:00

% Definição da diferencial de tempo, necessaria para o teste da rotina mas nao para a
resolução da equação diferencial por ode45

% Na rotina ode45 os elementos do vetor dy sao as derivadas do vetor y em relação ao
tempo e nao as diferenciais, portanto deve-se declarar dt = 1

dt = 1; % s

% Definição das condições iniciais, necessaria para o teste da rotina. Para a resolução da
equação diferencial por ode45 deve-se declarar a equivalencia entre as variaveis e os
elementos do vetor y

n_a = y(1); % mol
n_f = y(2); % mol
n_p = y(3); % mol
T = y(4); % K

% Parametros do cilindro e do motor

L = 10 * 0.0254; % comprimento da biela, m
B = 3.25 * 0.0254; % diâmetro do pistão, m
S = 4.5 * 0.0254; % curso do pistão, m
```

```

rc = 6.01;           % taxa de compressão, adimensional
a = S/2;            % raio da manivela do virabrequim, m
T_w = 373;          % temperatura das paredes do cilindro, K, igual a 100 graus C
omega = 900 / 60 * 2 * pi; % velocidade angular do virabrequim, rad/s
Sp = 2 / pi * omega * a; % velocidade media do pistao, m/s

A_ch = pi * B * (S / (rc-1) + B/4); % área da superfície do cabeçote, m2
A_p = pi * B^2 / 4; % área da coroa do pistão, m2

Vd = pi * B^2 * S / 4; % volume deslocado, m3
Vc = Vd / (rc-1); % volume da camara de combustão, m3

D_int = 34.19; % diametro da valvula de admissão, mm
D_exh = 34.19; % diametro da valvula de escapamento, mm

% Parametros do combustivel

n = 8; % Carbono, numero de atomos na formula
m = 18; % Hidrogenio, numero de atomos na formula
l = 0; % Oxigenio, numero de atomos na formula
k = 0; % Nitrogenio, numero de atomos na formula

mw_f = (12.0107 * n + 1,00794 * m + 15.9994 * l);

ni = n + m/4 - l/2; % coeficiente estequiométrico ni para não causar confusão com w,
% velocidade caracteristica na formula de Woschini, não confundir l minúsculo na fórmula
% com L maiúsculo, comprimento da biela!

fi = 0; % enriquecimento da mistura, 1 e a mistura estequiométrica; 0 e ar puro

R = 8.314472; % J/mol, constante universal dos gases

% Parametros da admissao e escapamento

p_int = 1,013; % bar, 1,013 é a pressão atmosférica ao nível do mar
p_exh = 1,013; % bar
T_int = 298; % K, 298 corresponde à temperatura ambiente de 25 graus C
T_exh = 298; % 1700; % K, freezing temperatura according to Heywood -> 850 K é
um valor típico de temperatura de gases no escapamento para o CFR

% Parametros do ar atmosferico

ura = 40; % umidade relativa do ar
x_a = frac_mol_ar(p_int, T_int, ura); % frações molares das especies no ar

xa_H2O = x_a(9);

% Pesos moleculares das especies

```

% mw é um vetor de dimensão 12 contendo os pesos moleculares das espécies de 1 a 12, de acordo com o nist webbook.

mw = [1.0079415.9994 14.00674 2.01588 17.0073 28.0101 30.0061 31.9988 18.0153 44.0095 28.01348 39.948]; % g/mol

% Peso molecular do ar

mw_a = x_a * mw'; % kg/mol, produto escalar das frações molares das espécies no ar pelo peso molecular destas espécies

% Peso molecular da mistura de ar e combustível

mw_af = (ni * mw_a + fi * mw_f) / (ni + fi); % kg/mol, massa molecular da mistura fresca na admissão (i) Substituir i por afm (air fuel mixture) para não causar confusão com o índice i

% *****

% Debug

% Linha abaixo acrescentada para tornar a composição dos gases residuais igual a do ar e testar a rotina sem chamar proptermeq

x_p = x_a; % motored condition

% Linha abaixo desativada para evitar erro e testar a rotina em 16abr2009, estava dando erro na rotina proptermeq

% x_p = proptermeq(n, m, l, k, fi, p_exh, T_exh, xa_H2O, 0.01); % vetor de frações molares dos produtos da combustão no instante e.v.o.

% *****

mw_p = x_p(1:12) * mw'; % kg/mol, massa molecular dos produtos da combustão, x_p(1:12) e o vetor de frações molares das espécies gasosas presentes nos produtos da combustão

% Calculo da posição do virabrequim e do eixo de comando de valvulas

teta_crank = omega * t; % posição angular do eixo do virabrequim, rad
teta_cam = teta_crank / 2; % posição angular do eixo de comando de valvulas, rad

% Calculo da area das paredes do cilindro

A = A_ch + A_p + pi * B * L / 2 * (L/a + 1 - cos(teta_crank) - sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank)^2)); % área das paredes internas do cilindro

% Calculo do volume do cilindro

```
V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank) - sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank)^2)));  
% volume instantaneo do cilindro
```

```
% Calculo do diferencial de volume do cilindro
```

```
dV = (rc-1)/2 * Vc * sin(teta_crank) * (1 + cos(teta_crank) / sqrt((L/a)^2 -  
sin(teta_crank)^2)) * omega * dt; % diferencial de volume do cilindro
```

```
% Calculo da pressao interna no cilindro
```

```
p = (n_a + n_f + n_p) * R * T / V * 1e-5; % pressao interna do cilindro, 1e-5 e a  
constante de conversao de Pascal para bar
```

```
% Calculo das propriedades termodinamicas do ar, combustivel e produtos da combustao,  
cuja composicao e considerada fixa apos e.v.o. x_p e o vetor cujos elementos sao as frações  
molares dos produtos de combustao apos a abertura da valvula de escapamento.
```

```
[h_p_T, cp_p_T] = proptermu(T, x_p(1:12));
```

```
cv_p_T = cp_p_T - R;
```

```
u_p_T = h_p_T - R * T / 1000; % kJ/mol, o fator 1000 e necessario para converter R de  
J/(mol K) para kJ/(mol K)
```

```
[h_p_T_exh, cp_p_T_exh] = proptermu(T_exh, x_p(1:12));
```

```
cv_p_T_exh = cp_p_T_exh - R;
```

```
u_p_T_exh = h_p_T_exh - R * T_exh / 1000; % kJ/mol, o fator 1000 e necessario para  
converter R de J/(mol K) para kJ/(mol K)
```

```
% a composicao x_p e fixada no momento da abertura da valvula de escapamento mas p, T  
seguem variando
```

```
% Ar
```

```
[h_a_T, cp_a_T] = proptermu(T, x_a); % x_a e o vetor de frações molares do ar
```

```
[h_a_T_int, cp_a_T_int] = proptermu(T_int, x_a);
```

```
cv_a_T = cp_a_T - R;
```

```
u_a_T = h_a_T - R * T / 1000; % kJ/mol, o fator 1000 e necessario para converter R de  
J/(mol K) para kJ/(mol K)
```

```
cv_a_T_int = cp_a_T_int - R;
```

```
u_a_T_int = h_a_T_int - R * T_int / 1000;
```

```
% Combustivel
```

```
[h_f_T, cp_f_T] = proptermf(T);  
termodinamicas do combustivel
```

```
% proptermf e a rotina de propriedades
```

```

[h_f_T_int, cp_f_T_int] = proptermf(T_int);

cv_f_T = cp_f_T - R;
u_f_T = h_f_T - R * T /1000;    % kJ/mol, o fator 1000 e necessario para converter R de
J/(mol K) para kJ/(mol K)

cv_f_T_int = cp_f_T_int - R;
u_f_T_int = h_f_T_int - R * T /1000;

% Mistura de ar e combustivel

cv_af = (ni * cv_a_T_int + fi * cv_f_T_int) / (ni + fi); % calor especifico a volume
constante da mistura ar/combustivel na admissao
u_af = (ni * u_a_T_int + fi * u_f_T_int) / (ni + fi); % energia interna da mistura
ar/combustivel na admissao

% Calculo dos coeficientes de expansao isentropica

k_af = (cv_af + R) / cv_af; % avaliado a temperatura T_int
k_p_T = (cv_p_T + R) / cv_p_T;
k_a_T = (cv_a_T + R) / cv_a_T;
k_f_T = (cv_f_T + R) / cv_f_T;
k_p_T_exh = (cv_p_T_exh + R) / cv_p_T_exh;

% Calculo de dn_a, dn_f, dn_p

% dn_a = variacao no numero de moles de ar no cilindro
% dn_f = variacao no numero de moles de moles de combustivel no cilindro
% dn_p = variacao no numero de moles de produtos da combustao no cilindro

% O sufixo exh refere-se a valvula de escapamento, e o sufixo p, aos gases de escapamento
ou produtos da combustao apos e.v.o.

% Calculo da abertura (lift) das valvulas de admissao e escapamento

[h_int, h_exh] = h(teta_cam); % levantamento (lift) das valvulas de admissao e
escapamento, mm

% Vazao atraves da valvula de admissao

A_int = h_int * pi * D_int; % area instantanea da cortina da valvula de admissao,
mm2

x = h_int;
Cd_int = exp(0.013266 * x^2 - 0.173652 * x - 0.621139); % coeficiente de descarga da
valvula de admissao, gas entra no cilindro, experimental
Cd_int_r = 0.32; % coeficiente de descarga da valvula de admissao, gas sai do
cilindro, estimado

```

% O sufixo int refere-se à admissão (intake), Cd_int é o coeficiente direto, quando os gases entram no cilindro; Cd_int_r é o coeficiente reverso, quando os gases saem do cilindro.

% Se $p > p_{int}$, saem produtos da combustão pela válvula de admissão para o coletor de admissão, a pressão na garganta é igual a p_{int} e a pressão de estagnação é igual à pressão no cilindro p . O sinal negativo significa que o número de moles de produtos da combustão no interior do cilindro está diminuindo. O sufixo p refere-se aos produtos da combustão, e é usado no lugar de e.

if ($p > p_{int}$) % saem produtos da combustao a temperatura T do cilindro

$$dn_{int} = -\sqrt{20} * A_{int} * Cd_{int_r} * p * (p_{int}/p)^{(1/k_{p_T})} * \sqrt{(1 - (p_{int}/p)^{(1-1/k_{p_T})})} * \sqrt{k_{p_T}/(k_{p_T}-1)} / \sqrt{R * T * mw_p} * dt;$$

% A_{int} (mm²), p (bar), R (J/(mol K)), T (K), mw (g/mol), dn_{int} (mol)

$dn_{int_a} = dn_{int} * n_a / (n_a + n_f + n_p);$

$dn_{int_f} = dn_{int} * n_f / (n_a + n_f + n_p);$

$dn_{int_p} = dn_{int} * n_p / (n_a + n_f + n_p);$

$hdn_{int} = h_{a_T} * dn_{int_a} + h_{f_T} * dn_{int_f} + h_{p_T} * dn_{int_p};$

% senão $p \leq p_{int}$ entra mistura de ar e combustível a temperatura T_{int} do coletor de admissão para dentro do cilindro

else

$$dn_{int} = \sqrt{20} * A_{int} * Cd_{int} * p_{int} * (p/p_{int})^{(1/k_{af})} * \sqrt{(1 - (p/p_{int})^{(1-1/k_{af})})} * \sqrt{k_{af}/(k_{af}-1)} / \sqrt{R * T_{int} * mw_{af}} * dt;$$

% O sufixo int refere-se ao coletor de admissão (intake manifold), o sufixo i à mistura no coletor (intake mixture)

$dn_{int_a} = dn_{int} * n_i / (n_i + f_i);$

$dn_{int_f} = dn_{int} * f_i / (n_i + f_i);$

$hdn_{int} = h_{a_T_{int}} * dn_{int_a} + h_{f_T_{int}} * dn_{int_f};$

% O sufixo a refere-se ao ar, o sufixo f ao combustível (fuel).

$dn_{int_p} = 0;$

% O sufixo p refere-se aos produtos da combustão (products)

end % if

% Vazão através da válvula de escapamento

% $h_{exh} = h_{exh}(teta_crank);$ linha desativada

```

A_exh = h_exh * pi * D_exh; % mm2
% Cd_exh = 0.67;
x = h_exh;
Cd_exh = exp(0.002556 * x^4 - 0.041872 * x^3 + 0.245456 * x^2 - 0.630295 * x +
0.003285); % experimental
Cd_exh_r = 0.67; % estimado

```

% O sufixo exh refere-se ao escapamento (exhaust), Cd_exh é o coeficiente direto, quando os gases entram no cilindro; Cd_exh_r é o coeficiente reverso, quando os gases saem do cilindro.

```
% Se p > p_exh
```

```
if (p > p_exh) % saem produtos de escapamento a temperatura T do cilindro para o coletor de escapamento
```

```

dn_exh = -sqrt(20) * A_exh * Cd_exh_r * p * (p_exh/p)^(1/k_p_T) * sqrt((1-
(p_exh/p)^(1-1/k_p_T))*sqrt(k_p_T/(k_p_T-1))) / sqrt(R * T * mw_p)*dt;

```

% O sufixo exh refere-se ao escapamento (exhaust), o sufixo p aos produtos de combustão. O sinal negativo indica que estão saindo produtos da combustão do cilindro para a tubulação de escapamento.

```

dn_exh_a = dn_exh * n_a / (n_a + n_f + n_p);
dn_exh_f = dn_exh * n_f / (n_a + n_f + n_p);
dn_exh_p = dn_exh * n_p / (n_a + n_f + n_p);

```

```
hdn_exh = h_a_T * dn_exh_a + h_f_T * dn_exh_f + h_p_T * dn_exh_p;
```

```
% senão p <= p_exh entram produtos da combustão a temperatura T_exh do coletor de escapamento para dentro do cilindro
```

```
else
```

```

dn_exh = sqrt(20) * A_exh * Cd_exh * p_exh * (p/p_exh)^(1/k_p_T_exh) * sqrt((1-
(p/p_exh)^(1-1/k_p_T_exh))*sqrt(k_p_T_exh/(k_p_T_exh-1))) / sqrt(R * T_exh *
mw_p) * dt;

```

% O sinal positivo indica que estão entrando produtos da combustão provenientes da tubulação de escapamento para dentro do cilindro.

```

dn_exh_a = 0;
dn_exh_f = 0;
dn_exh_p = dn_exh;

```

```
hdn_exh = h_p_T_exh * dn_exh_p;
```

```
end % if
```

```

% Calculo da variacao do numero de mois de ar, combustivel, e produtos da combustao
no interior do cilindro

dn_a = dn_int_a + dn_exh_a;
dn_f = dn_int_f + dn_exh_f;
dn_p = dn_int_p + dn_exh_p;

% Calculo da troca de calor com as paredes

% hc e o coef de troca de calor por convecção

c1 = 2.28; % coeficiente multiplicador de Sp na formula de Woschini de transferencia
de calor
w = c1 * Sp; % velocidade caracteristica de Woschini

% O símbolo w (velocidade característica) na fórmula de Woschini não deve ser
confundido com o símbolo w (razão estequiométrica molar) nos cálculos termodinâmicos!

% Linha abaixo desativada para testar o ciclo adiabatico

% hc = 3.26 * B^-0.2 * (100*p)^0.8 * T^-0.55 * w^0.8; % W /(m2 K) fórmula de
Woschini, Heywood, pág. 680. O fator 100 multiplicando p é para converter a pressão de
bar para kPa,

hc = 0; % ciclo adiabatico

% Linha abaixo desativada para testar o modelo adiabatico

% dQ = hc * A * (T_w-T) * dt; % A (m2), T(K), dt(s), dQ(W ou J/s)

dQ = 0;

% Calculo do diferencial de temperatura dos gases no interior do cilindro

% Conforme corsair:\mestrado\simulação de motores\matlab\admissao2.nb

T_p = T_exh;
T_a = T_int;
T_f = T_int;

% dT = (dQ - 1e5*p*dV + R*(T_p*dn_p + T_a*dn_a + T_f*dn_f))/(n_p*cv_p_T +
n_a*cv_a_T + n_f*cv_f_T); % o fator 1e5 converte p de bar para Pascal e o fator 1000 de
kJ para J

hc = Woschni_1(omega, t, h_int, h_exh, B, S, p, V, T);
dQ = hc * A * (T_w - T) * dt;
dT = (dQ - 1e5 * p * dV + 1000*(hdn_int + hdn_exh) - 1000*(u_a_T * dn_a + u_f_T *
dn_f + u_p_T * dn_p)) / (n_a * cv_a_T + n_f * cv_f_T + n_p * cv_p_T);

```

```

% Definição do vetor y cujos elementos são as variáveis de integração do sistema de
equações diferenciais por Runge Kutta pela função ode45 do Matlab

y = [n_a n_f n_p T]; % vetor definido como y ao invés de x para não causar confusão
com o vetor x das frações molares

dy = [dn_a dn_f dn_p dT]'; % derivadas do vetor y agrupadas em um vetor coluna

% Condições iniciais: virabrequim no PMS, válvula de escapamento ainda aberta e próxima
do fechamento
% Condições iniciais: po = pexh e To = Texh

% A equação diferencial é resolvida pelo método de Runge-Kutta pela função ode45,
% chamada com os argumentos

% yo = [nao nfo npo To]; vetor de condições iniciais

% [t, y] = ode45(@exh_adm_comp, [tmin, tmax], yo)

% tmin = 2 * pi * omega, condição inicial da posição angular do virabrequim: PMS próximo
ao fechamento da válvula de escapamento

% tmax = teta_crank_max / omega, limite de integração

% end % declaração de função

```

Anexo B

Modelo de duas zonas de combustão

A Figura 1 mostra os volumes de controle correspondentes às zonas queimada e não queimada. Aplicando a Primeira Lei e a equação de estado dos gases ideais a estas zonas, é possível escrever seis equações diferenciais:

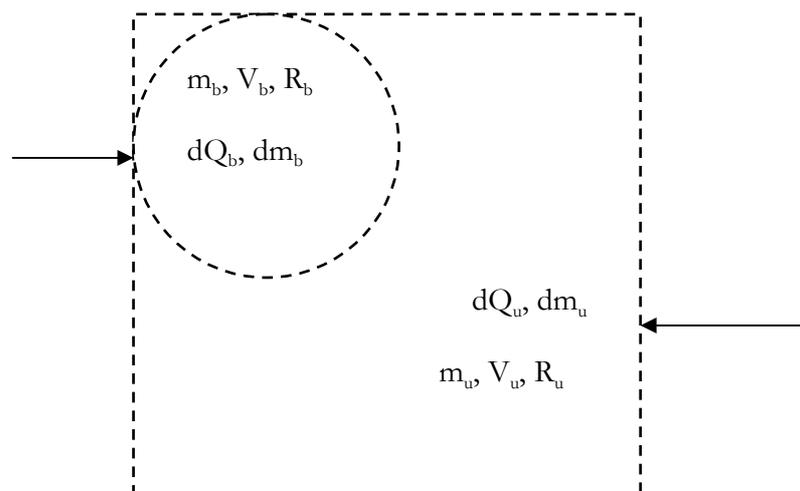


Figura B.1: Volumes de controle durante a combustão.

$$\text{Primeira Lei zona queimada: } dH_b = dQ_b + V_b dp \quad (1)$$

$$\text{Primeira Lei, zona não queimada: } dH_u = dQ_u + V_u dp \quad (2)$$

$$\text{Primeira Lei, todo o cilindro: } dH = dH_u + dH_b = dQ_b + dQ_u + V dp \quad (3)$$

Equação de estado, zona queimada:

$$p dV_b + V_b dp = R_b T_b dm_b + m_b R_b dT_b + m_b T_b dR_b \quad (4)$$

Equação de estado, zona não queimada: $p dV_u + V_u dp = R_u T_u dm_u + m_u R_u dT_u$ (5)

Equação de estado, todo o cilindro:

$$p dV + V dp = R_u T_u dm_u + m_u R_u dT_u + R_b T_b dm_b + m_b R_b dT_b + m_b T_b dR_b \quad (6)$$

Duas destas são combinações lineares das outras quatro, resultando apenas quatro equações diferenciais independentes.

A partir de considerações geométricas e de conservação de massa e de energia, é possível escrever mais duas equações algébricas e três diferenciais.

Geometria do cilindro: $V_b + V_u = V$ (7)

$$dV_b + dV_u = dV \quad (8)$$

Conservação de massa: $m_b + m_u = m$ (9)

$$dm_b + dm_u = dm = 0 \quad (10)$$

Conservação de energia: $dQ_b + dQ_u = dQ$ (11)

Zona Queimada

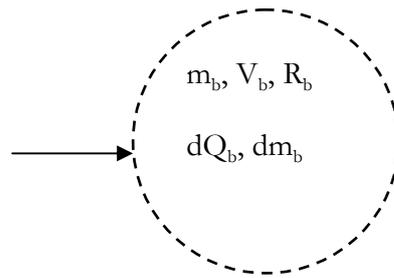


Figura B.2: Volume de controle da zona queimada durante a combustão

Primeira Lei

$$dH_b = dQ_b + V_b dp \quad (12)$$

$$d(m_b h_b) = dQ_b + V_b dp \quad (13)$$

Derivando o lado esquerdo da eq. (13),

$$m_b dh_b + h_b dm_b = dQ_b + V_b dp \quad (14)$$

Substituindo a igualdade

$$dh_b = c_{p_b} dT_b + \partial h_b / \partial p dp \quad (15)$$

na eq. (3), resulta

$$m_b (c_{p_b} dT_b + \partial h_b / \partial p dp) + h_b dm_b = dQ_b + V_b dp \quad (16)$$

Agrupando os termos da eq. (16),

$$m_b c_{p_b} dT_b + m_b \frac{\partial h_b}{\partial p} dp + h_b dm_b - dQ_b - V_b dp = 0 \quad (17)$$

Agrupando os termos da equação (17),

$$m_b c_{p_b} dT_b + (m_b \frac{\partial h_b}{\partial p} - V_b) dp + m_b h_b df_b - dQ_b = 0 \quad (18)$$

Substituindo V_b por $m_b R_b T_b / p$ na equação (18),

$$m_b c_{p_b} dT_b + (m_b \frac{\partial h_b}{\partial p} - m_b R_b T_b / p) dp + m_b h_b df_b - dQ_b = 0 \quad (19)$$

Agrupando os termos da equação (19),

$$m_b c_{p_b} dT_b + m_b (\frac{\partial h_b}{\partial p} - R_b T_b / p) dp + m_b h_b df_b - dQ_b = 0 \quad (20)$$

Dividindo a equação (20) por m_b ,

$$c_{p_b} dT_b + (p \frac{\partial h_b}{\partial p} - R_b T_b) dp / p + h_b df_b / f_b - dQ_b / (f_b m) = 0 \quad (21)$$

Dividindo a equação (21) por R_b ,

$$c_{p_b} / R_b dT_b / T_b + (p / R_b T_b \frac{\partial h_b}{\partial p} - 1) dp / p + h_b / (R_b T_b) df_b / f_b - dQ_b / (f_b m R_b T_b) = 0 \quad (22)$$

Substituindo c_{p_b} / R_b por $k_b / (k_b - 1)$ na equação (22), resulta a equação (23), cujos termos são adimensionais.

$$k_b / (k_b - 1) dT_b / T_b + (p / R_b T_b \frac{\partial h_b}{\partial p} - 1) dp / p + h_b / (R_b T_b) df_b / f_b - dQ_b / (f_b m R_b T_b) = 0 \quad (23)$$

Equação de Estado

$$d(p V_b) = d(m_b R_b T_b) = m_b d(f_b R_b T_b) \quad (24)$$

Derivando o lado esquerdo da equação (24),

$$p dV_b + V_b dp = m_b (R_b T_b df_b + f_b T_b dR_b + f_b R_b dT_b) \quad (25)$$

Incluindo os efeitos da dissociação e recombinação na equação (25),

$$dR_b = \frac{\partial R_b}{\partial p} dp + \frac{\partial R_b}{\partial T} dT_b \quad (26)$$

$$p dV_b + V_b dp = m_b (R_b T_b df_b + f_b T_b (\frac{\partial R_b}{\partial p} dp + \frac{\partial R_b}{\partial T} dT_b) + f_b R_b dT_b) \quad (27)$$

Agrupando os termos da equação (27),

$$p dV_b + (V_b - m_b f_b T_b \frac{\partial R_b}{\partial p}) dp = m_b R_b T_b df_b + m_b f_b R_b (1 + T_b / R_b \frac{\partial R_b}{\partial T}) dT_b \quad (28)$$

Definindo a variável auxiliar

$$A_{xt} = 1 + T_b/R_b \partial R_b/\partial T \quad (29)$$

Substituindo a equação (29) na (28),

$$p dV_b + (V_b - m f_b T_b \partial R_b/\partial p) dp = m R_b T_b df_b + m f_b R_b A_{xt} dT_b \quad (30)$$

Agrupando os termos da equação (30),

$$p dV_b + V_b (1 - p/R_b \partial R_b/\partial p) dp = m R_b T_b df_b + m f_b R_b A_{xt} dT_b \quad (31)$$

Definindo a variável auxiliar

$$A_{xp} = 1 - p/R_b \partial R_b/\partial p \quad (32)$$

Substituindo a equação (32) na (31),

$$p dV_b + V_b A_{xp} dp = m R_b T_b df_b + m f_b R_b A_{xt} dT_b \quad (33)$$

Zona Não Queimada

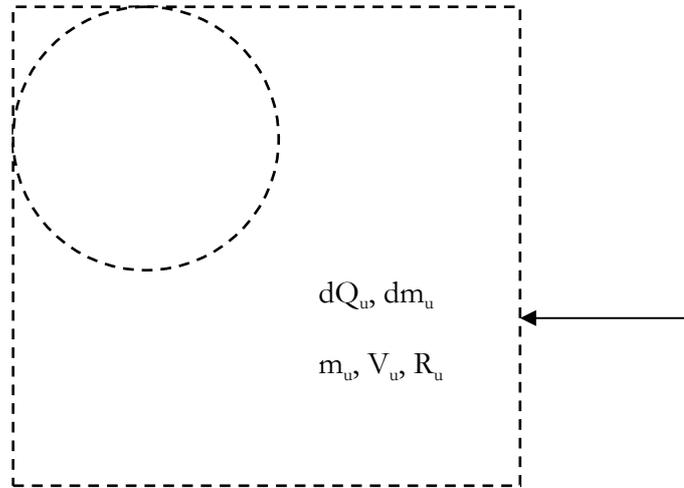


Figura B.3: Volume de controle da zona não queimada durante a combustão

Equação de estado

$$d(p V_u) = d(m_u R_u T_u) \quad (34)$$

Derivando o lado esquerdo da equação (34),

$$p dV_u + V_u dp = m (R_u T_u df_u + f_u R_u dT_u) \quad (35)$$

Considerando a geometria do cilindro

$$V_u = V - V_b \quad (36)$$

$$dV_u = dV - dV_b \quad (37)$$

e dividindo a equação (35) por m ,

$$p/m dV - p/m dV_b + (V-V_b)/m dp = -R_u T_u df_b + (1-f_b) R_u dT_u \quad (38)$$

Rearranjando os termos da equação (38),

$$p/m dV - p/m dV_b + (V-V_b)/m dp + R_u T_u df_b - (1-f_b) R_u dT_u = 0 \quad (39)$$

Dividindo a equação (39) por $R_u T_u$, resulta a equação (40), cujos termos são adimensionais.

$$\frac{p}{m R_u T_u} dV - \frac{p}{m R_u T_u} dV_b + \frac{V - V_b}{m R_u T_u} dp + df_b - (1 - f_b) \frac{dT_u}{T_u} = 0 \quad (40)$$

Agrupando os termos da equação (40),

$$dV - dV_b + (V - V_b) \frac{dp}{p} + \frac{m R_u T_u}{p} df_b - (1 - f_b) \frac{m R_u}{p} dT_u = 0 \quad (41)$$

Explicitando dV_b na equação (41), resulta

$$dV_b = dV + (V - V_b) \frac{dp}{p} + \frac{m R_u T_u}{p} df_b - (1 - f_b) \frac{m R_u}{p} dT_u \quad (42)$$

Substituindo a equação (42) na equação de estado da Zona Queimada (33), a variável V_b é eliminada e o sistema é reduzido de quatro para três equações.

$$p dV_b + V_b A_x p dp = m R_b T_b df_b + m f_b R_b A_x dT_b \quad (33)$$

$$p \left(dV + (V - V_b) \frac{dp}{p} + \frac{m R_u T_u}{p} df_b - (1 - f_b) \frac{m R_u}{p} dT_u \right) + V_b A_x p dp = m R_b T_b df_b + m f_b R_b A_x dT_b \quad (43)$$

$$p dV + (V - V_b) dp + m R_u T_u df_b - (1 - f_b) m R_u dT_u + V_b A_x p dp = m R_b T_b df_b + m f_b R_b A_x dT_b \quad (44)$$

Agrupando os termos da equação (44), a incógnita dV_b é eliminada e resulta uma equação que atende simultaneamente à equação de estado dos gases ideais aplicada às Zonas Queimada e Não Queimada.

$$p dV + (V - V_b) dp + m R_u T_u df_b - (1 - f_b) m R_u dT_u + V_b A_x p dp = m R_b T_b df_b + m f_b R_b A_x dT_b \quad (45)$$

Rearranjando os termos da equação (45),

$$p dV + (V - V_b + V_b A_x p) dp + (m R_u T_u - m R_b T_b) df_b - (1 - f_b) m R_u dT_u - m f_b R_b A_x T_b dT_b = 0 \quad (46)$$

Simplificando a equação (46),

$$p dV + (V + V_b (A_x p - 1)) dp + m (R_u T_u - R_b T_b) df_b - (1 - f_b) m R_u dT_u - m f_b R_b A_x T_b dT_b = 0 \quad (47)$$

Primeira Lei da Termodinâmica

$$dH_u = dQ_u + V_u dp \quad (48)$$

Substituindo H_u por $m_u h_u$ na equação (48),

$$d(m_u h_u) = dQ_u + V_u dp \quad (49)$$

Derivando o lado esquerdo da equação (49),

$$m_u dh_u + h_u dm_u = dQ_u + V_u dp \quad (50)$$

Considerando a conservação de massa,

$$m_u = m - m_b \quad (51)$$

Substituindo a equação (51) na (50),

$$(m - m_b) cp_u dT_u + h_u (-dm_b) = dQ_u + V_u dp \quad (52)$$

ou, em termos da fração de massa queimada,

$$m (1 - f_b) cp_u dT_u - m h_u df_b = dQ_u + V_u dp \quad (53)$$

Substituindo V_u por $m (1 - f_b) R_u T_u / p$ na equação (53),

$$m (1 - f_b) cp_u dT_u - m h_u df_b = dQ_u + m (1 - f_b) R_u T_u dp / p \quad (54)$$

Rearranjando os termos da equação (54),

$$(1 - f_b) cp_u / R_u dT_u / T_u - h_u / (R_u T_u) df_b - dQ_u / (m R_u T_u) - (1 - f_b) dp / p = 0 \quad (55)$$

$$k_b / (k_b - 1) dT_b / T_b + (p / R_b T_b) \partial h_b / \partial p - 1 dp / p + h_b / (R_b T_b) df_b / f_b - dQ_b / (f_b m R_b T_b) = 0 \quad (23)$$

Reescrevendo a equação (47),

$$p dV + (V + V_b (A_x p - 1)) dp + m (R_u T_u - R_b T_b) df_b - (1 - f_b) m R_u dT_u - m f_b R_b A_x T_b dT_b = 0 \quad (47)$$

Dividindo a equação (47) por $m R_u T_u$,

$$\frac{P}{m R_u T_u} dV + \left(\frac{V + V_b (Axp - 1)}{m R_u T_u} \right) dp + \left(1 - \frac{R_b T_b}{R_u T_u} \right) df_b - (1 - f_b) \frac{dT_u}{T_u} - \frac{R_b f_b}{R_u T_u} Axt dT_b = 0 \quad (56)$$

Substituindo V_b por $m f_b R_b T_b / p$ na equação (56),

$$\frac{P}{m R_u T_u} dV + \left(\frac{p V}{m R_u T_u} + f_b \frac{R_b T_b (Axp - 1)}{R_u T_u} \right) \frac{dp}{p} + \left(1 - \frac{R_b T_b}{R_u T_u} \right) df_b - (1 - f_b) \frac{dT_u}{T_u} - \frac{R_b f_b}{R_u T_u} Axt dT_b = 0 \quad (57)$$

As equações (23), (55) e (57) formam um sistema de três equações diferenciais lineares cuja resolução permite determinar dp , dT_b , dT_u a partir de df_b , dV , dQ_b , dQ_u (modelo preditivo) ou então df_b , dT_b , dT_u a partir de dp , dV , dQ_b , dQ_u (modelo de diagnose).

Para isto, é necessário um modelo que descreva o diferencial de calor dQ em função de variáveis conhecidas, e outro que descreva a distribuição do diferencial de calor entre a zona queimada e a não queimada.

A correlação de Woschni,

$$dQ = h_c A (T_w - T_m) dt \quad (58)$$

onde T_m é a temperatura média dos gases no interior do cilindro, definida como

$$T_m = f_b T_b + (1 - f_b) T_u \quad (59)$$

e o modelo da Cummins,

$$dQ_b = \frac{f_b T_b}{f_b T_b + (1 - f_b) T_u} \quad (60)$$

$$dQ_u = \frac{(1 - f_b) T_u}{f_b T_b + (1 - f_b) T_u} \quad (61)$$

atendem a esta necessidade e, substituídos nas equações (23), (55) e (57), constituem um sistema de equações diferenciais que pode ser resolvido por inversão de matrizes, após rearranjo de seus termos de tal forma que fiquem três variáveis à esquerda e quatro à direita do sinal de igualdade.

$$\begin{array}{ccccccc} -\frac{h_u}{R_u T_u} df_b & + \frac{cp_u}{R_u} \left(\frac{1 - f_b}{T_u} \right) dT_u & 0 & -\frac{1 - f_b}{p} dp & -\frac{1}{m R_u T_u} dQ_u & 0 & = 0 \\ \frac{h_b}{f_b R_b T_b} df_b & 0 & + \frac{k_b}{k_b - 1} \frac{1}{T_b} dT_b & + \left(\frac{p}{R_b T_b} \frac{\partial h_b}{\partial p} - 1 \right) \frac{1}{p} dp & 0 & -\frac{1}{f_b m R_b T_b} dQ_b & = 0 \\ \left(1 - \frac{R_b T_b}{R_u T_u} \right) df_b & - (1 - f_b) \frac{dT_u}{T_u} & - \frac{R_b f_b}{R_u T_u} Axt dT_b & + \left(\frac{p V}{m R_u T_u} + f_b \frac{R_b T_b (Axp - 1)}{R_u T_u} \right) \frac{dp}{p} + \frac{p}{m R_u T_u} dV & 0 & 0 & = 0 \end{array} \quad (62)$$

Rearranjando os termos de forma que dp , dT_b , dT_u fiquem à esquerda da igualdade, resulta o modelo preditivo.

Rearranjando os termos de forma que df_b , dT_b , dT_u fiquem à esquerda da igualdade, resulta o modelo de diagnose.

Convertendo as equações para base molar e rearranjando os termos para obter o modelo preditivo, resulta

$$\begin{pmatrix} dp/dt \\ dT_u/dt \\ dT_b/dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{100000 p} & \frac{ku}{(-1+ku) Tu} & 0 \\ -\frac{1}{p} + \frac{1000 \left(\frac{dh_b}{dp} - \frac{hb}{mw_b} \frac{dmw_b}{dp} \right)}{R Tb} & 0 & \frac{kb}{(-1+kb) Tb} \\ \frac{100000}{1-fb + \frac{Axp fb mw_u Tb}{mw_b Tu}} & -\frac{1-fb}{Tu} & -\frac{Axt fb mw_u}{mw_b Tu} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{dQ mw_u}{1000 m R (fb (Tb - Tu) + Tu)} & 0 & 0 \\ \frac{dQ mw_b}{1000 m R (fb (Tb - Tu) + Tu)} & 0 & \frac{1000 dfb (-mw_u hb - mw_b hu)}{fb mw_u R Tb} \\ 0 & -\frac{100 dt mw_u dV/dt p}{m R Tu} & dfb \left(-1 + \frac{mw_u Tb}{mw_b Tu} \right) \end{pmatrix} \quad (63)$$

ou

$$\begin{pmatrix} dp/dt \\ dT_u/dt \\ dT_b/dt \end{pmatrix} = A^{-1} \cdot B \quad (63.a)$$

onde

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{1}{100000 p} & \frac{ku}{(-1+ku) Tu} & 0 \\ -\frac{1}{p} + \frac{1000 \left(\frac{dh_b}{dp} - \frac{hb}{mw_b} \frac{dmw_b}{dp} \right)}{R Tb} & 0 & \frac{kb}{(-1+kb) Tb} \\ \frac{100000}{1-fb + \frac{Axp fb mw_u Tb}{mw_b Tu}} & -\frac{1-fb}{Tu} & -\frac{Axt fb mw_u}{mw_b Tu} \end{pmatrix} \quad (64)$$

$$B = \begin{pmatrix} \frac{dQ/dt mw_u}{1000 m R (fb (Tb - Tu) + Tu)} & 0 & 0 \\ \frac{dQ/dt mw_b}{1000 m R (fb (Tb - Tu) + Tu)} & 0 & \frac{1000 dfb/dt (mw_b hu - mw_u hb)}{fb mw_u R Tb} \\ 0 & -\frac{100 mw_u dV/dt p}{m R Tu} & \frac{dfb}{dt} \left(-1 + \frac{mw_u Tb}{mw_b Tu} \right) \end{pmatrix} \quad (65)$$

O sistema de equações está em base molar e suas unidades de trabalho são, respectivamente:

mw_u, mw_b	g/mol
p	bar
h_u, h_b	kJ/mol
dh_b/dp	kJ/bar
dmw_b/dp	g/(mol . bar)

Os coeficientes transformam as unidades de trabalho em unidades coerentes do sistema MKS, portanto as unidades de dp/dt , dT_u/dt , dT_b/dt são, respectivamente:

dp/dt	Pa/s
dT_u/dt	K/s

dT_b/dt K/s

Para manter a coerência do modelo é necessário multiplicar a taxa de variação da pressão por 10^{-5} para convertê-la para bar/s, uma vez que é esta a unidade em que está expressa a pressão nas rotinas de cálculo de propriedades termodinâmicas.

Anexo C

Determinação da propriedades termodinâmicas e das frações molares

```
function[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeg(n, m, l, k, fi, p, T, x_H2O, x8o)

% O método da secante converge após 5 iterações para um erro < 1e-5

% x e o vetor cujos elementos são as frações molares, x_H2O e calculado pela rotina
frac_mol_ar

% fi é o enriquecimento da mistura, adimensional

% Definição da pressão de referência po

po = 1; % bar

% Definição da variável auxiliar t, temperatura reduzida, útil para o cálculo dos polinômios
da JANAF, não confundir com o tempo t

t = T / 1000;

% po é constante e igual a 1 bar, p e T são a pressão de combustão em bar e a temperatura
de combustão em K

% Definição da constante universal dos gases

R = 8.314472; % J/(mol K)

% Definição dos valores de alfa, beta e gama

alfa = 3.727827; % xN2/xO2
beta = 0.001829; % xCO2/xO2
delta = 0.044591; % xAr/xO2

% Cálculo do valor de gama
```

```

gama = (1 + alfa + beta + delta) * x_H2O / (1 - x_H2O);

% Calculo das constantes auxiliares ro, m1, n1, r, r1, r2

ro = (n + m / 4 - 1 / 2) / fi;

m1 = m + 2 * gama * ro;

n1 = n + beta * ro;

r = 1 / 2 + ro * (1 + beta + gama / 2);

r1 = k / 2 + alfa * ro;

r2 = delta * ro;

% Calculo do valor inicial da fração molar de mistura x13 em função do valor inicial da
fração molar de O2 x8o

x13o = (1 - x8o) / (m1 / 2 + n1 + r1 + r2);

% Definição dos coeficientes dos polinômios do NIST para cálculo das propriedades
termodinamicas conforme a faixa de temperatura

% No Matlab os vetores são definidos entre colchetes e o separador dos elementos é o
espaço ou a vírgula

A1 = [20.78603 4.85064e-10 -1.5829200000000002e-10 1.5250999999999998e-11
3.1963499999999996e-11 211.802 139.8711 217.9994];

A2 = [21.1861 -0.502314 0.168694 -0.008962 0.075664 243.1306 187.2591
249.1731];

A3 = [21.13581 -0.388842 0.043545 0.024685 -0.025678 466.311 178.8263
472.6832];

if (T<1000)

A4 = [33.066178 -11.363417 11.432816 -2.772874 -0.158558 -9.980797
172.707974 0];

elseif (T<2500)

A4 = [18.563083 12.257357 -2.859786 0.268238 1.97799 -1.147438 156.288133
0];

else

```

```
A4 = [43.41356 -4.293079 1.272428 -0.096876 -20.533862 -38.515158 162.081354  
0];
```

```
end % if
```

```
if(T<1300)
```

```
A5 = [32.27768 -11.36291 13.60545 -3.846486 -0.001335 29.75113 225.5783  
38.98706];
```

```
else
```

```
A5 = [28.74701 4.714489 -0.814725 0.054748 -2.747829 26.41439 214.1166  
38.98706];
```

```
end % if
```

```
if(T<1300)
```

```
A6 = [25.56759 6.09613 4.054656 -2.671301 0.131021 -118.0089 227.3665 -  
110.5271];
```

```
else
```

```
A6 = [35.1507 1.300095 -0.205921 0.01355 -3.28278 -127.8375 231.712 -  
110.5271];
```

```
end % if
```

```
if(T<1200)
```

```
A7 = [23.83491 12.58878 -1.139011 -1.497459 0.214194 83.35783 237.1219  
90.29114];
```

```
else
```

```
A7 = [35.99169 0.95717 -0.148032 0.009974 -3.004088 73.10787 246.1619  
90.29114];
```

```
end % if
```

```
A8 = [29.659 6.137261 -1.186521 0.09578 -0.219663 -9.861391 237.948 0];
```

```
if(T<1700)
```

```
A9 = [30.092 6.832514 6.793435 -2.53448 0.082139 -250.881 223.3967 -  
241.8264];
```

```
else
```

```

A9 = [41.96426 8.622053 -1.49978 0.098119 -11.15764 -272.1797 219.7809 -
241.8264];

end % if

if(T<1200)

A10 = [24.99735 55.18696 -33.69137 7.948387 -0.136638 -403.6075 228.2431 -
393.5224];

else

A10 = [58.16639 2.720074 -0.492289 0.038844 -6.447293 -425.9186 263.6125 -
393.5224];

end % if

A11 = [26.092 8.218801 -1.976141 0.159274 0.044434 -7.98923 221.02 0];

A12 = [20.786 2.8259099999999997e-7 -1.46419e-7 1.09213e-8 -
3.6613699999999997e-8 -6.19735 179.999 0];

% A matriz de coeficientes a é definida como uma coluna de vetores linha, no Matlab o
separador de linhas e o ponto e vírgula, cada elemento Ai da matriz a e um vetor linha

a = [A1; A2; A3; A4; A5; A6; A7; A8; A9; A10; A11; A12];

% Cálculo dos valores de entropia de referência so (T, po), entropia s(T, p), entalpia h(T) e
função de Gibbs g(T, p)

% As unidades de cp, so e s sao J/(mol K) enquanto a de h e kJ/mol!

% É necessário um fator de conversão de 1000:1 na fórmula de cálculo da função de Gibbs
(s deve ser dividido por 1000 e assim convertido a kJ/mol, mesma unidade de h)

% A fórmula de h já está considerando a entalpia de formação pois foi excluído o termo -H
da fórmula do NIST (deve calcular ho).

for i = 1:12,

so(i) = a(i, 1) * log(t) + a(i,2) * t + a(i,3) * t^2/2 + a(i,4) * t^3/3 - a(i,5) / (2*t^2) + a(i,7);
% J/(mol K)

s(i) = so(i) - R * log(p/po); % J/(mol K)

h(i) = a(i,1) * t + a(i,2) * t^2/2 + a(i,3) * t^3/3 + a(i,4) * t^4/4 - a(i,5)/t + a(i,6); %
kJ/mol

g(i) = h(i) - t * so(i); % kJ/mol, nao e necessario dividir so(i) por 1000 pois t e igual a T
/1000.

```

```
dso_dt(i) = (a(i,1)/t + a(i,2) + a(i,3)*t + a(i,4)*t^2 + a(i,5)/t^3); % J/(mol K) * 1000/K
```

```
dh_dt(i) = (a(i,1) + a(i,2)*t + a(i,3)*t^2 + a(i,4)*t^3 + a(i,5)/t^2); % J/(mol K)
```

```
end % for
```

```
% Definição do vetor cp, calor específico à pressão constante, igual à derivada da entalpia em relação à temperatura.
```

```
cp = dh_dt;
```

```
% Definição do vetor dg_dT, derivada da função de Gibbs em relação a temperatura
```

```
% so e dso_dT estão dadas em J/K enquanto dh_dT está em J/K, daí a constante 1/1000 na equação abaixo.
```

```
dg_dt = dh_dt - t * dso_dt - so; % J/(mol K)
```

```
dg_dT = dg_dt / 1000;
```

```
% Cálculo das constantes de equilíbrio Kpi
```

```
Kp1 = exp(-1/R/t * (g(1) - g(4)/2));
```

```
Kp2 = exp(-1/R/t * (g(2) - g(8)/2));
```

```
Kp3 = exp(-1/R/t * (g(3) - g(11)/2));
```

```
Kp5 = exp(-1/R/t * (g(5) - g(4)/2 - g(8)/2));
```

```
Kp7 = exp(-1/R/t * (g(7) - g(8)/2 - g(11)/2));
```

```
Kp9 = exp(-1/R/t * (g(9) - g(4) - g(8)/2));
```

```
Kp10 = exp(-1/R/t * (g(10) - g(6) - g(8)/2));
```

```
dKp1_dt = Kp1/(R*t) * ((g(1) - g(4)/2)/t - (dg_dt(1) - dg_dt(4)/2));
```

```
dKp2_dt = Kp2/(R*t) * ((g(2) - g(8)/2)/t - (dg_dt(2) - dg_dt(8)/2));
```

```
dKp3_dt = Kp3/(R*t) * ((g(3) - g(11)/2)/t - (dg_dt(3) - dg_dt(11)/2));
```

```
dKp5_dt = Kp5/(R*t) * ((g(5) - g(4)/2 - g(8)/2)/t - (dg_dt(5) - dg_dt(4)/2 - dg_dt(8)/2));
```

```

dKp7_dt = Kp7/(R*t) * ((g(7) - g(8)/2 - g(11)/2)/t - (dg_dt(7) - dg_dt(8)/2 -
dg_dt(11)/2));
dKp9_dt = Kp9/(R*t) * ((g(9) - g(4) - g(8)/2)/t - (dg_dt(9) - dg_dt(4) - dg_dt(8)/2));
dKp10_dt = Kp10/(R*t) * ((g(10) - g(6) - g(8)/2)/t - (dg_dt(10) - dg_dt(6) - dg_dt(8)/2));

```

% Definição do vetor Kp e de sua derivada em relação à temperatura reduzida dKp_dt

```
Kp = [Kp1, Kp2, Kp3, 0, Kp5, 0, Kp7, 0, Kp9, Kp10];
```

```
dKp_dt = [dKp1_dt, dKp2_dt, dKp3_dt, 0, dKp5_dt, 0, dKp7_dt, 0, dKp9_dt,
dKp10_dt];
```

```
%
*****
```

% Cálculo das constantes auxiliares Ci

```

C1 = Kp1 / sqrt(p/po);
C2 = Kp2 / sqrt(p/po);
C3 = Kp3 / sqrt(p/po);
C5 = Kp5;
C7 = Kp7;
C9 = Kp9 * sqrt(p/po);
C10 = Kp10 * sqrt(p/po);

```

% Definição do vetor C e de suas derivadas em relação à pressão p e temperatura T

```
Cp = [C1, C2, C3, 0, C5, 0, C7, 0, C9, C10]; % Cp significa constante de proporcionalidade
```

```
% *****
```

% Definição do vetor dC_dp cujos elementos são as derivadas das constantes auxiliares C em relação a p

```

dC1_dp = -Kp1 / (2 * (p/po)^(3/2) * po);
dC2_dp = -Kp2 / (2 * (p/po)^(3/2) * po);
dC3_dp = -Kp3 / (2 * (p/po)^(3/2) * po);
dC5_dp = 0;
dC7_dp = 0;
dC9_dp = Kp9 / (2 * sqrt(p/po) * po);
dC10_dp = Kp10 / (2 * sqrt(p/po) * po);

```

```
dCp_dp = [dC1_dp, dC2_dp, dC3_dp, 0, dC5_dp, 0, dC7_dp, 0, dC9_dp, dC10_dp];
```

```
dCp_dt = [ dKp1_dt * sqrt(po/p), dKp2_dt * sqrt(po/p), dKp3_dt * sqrt(po/p), 0,
dKp5_dt, 0, dKp7_dt, 0, dKp9_dt * sqrt(p/po), dKp10_dt * sqrt(p/po) ];
```

```
% *****
```

```
% Definição das derivadas das constantes auxiliares C em relação a temperatura reduzida t
```

```
dC1_dt = dCp_dt(1);
dC2_dt = dCp_dt(2);
dC3_dt = dCp_dt(3);
dC4_dt = 0;
dC5_dt = dCp_dt(5);
dC6_dt = 0;
dC7_dt = dCp_dt(7);
dC8_dt = 0;
dC9_dt = dCp_dt(9);
dC10_dt = dCp_dt(10);
```

```
% Cálculo das raízes de f1 = 0, f2 = 0 pelo método de Newton a partir das estimativas
iniciais x8o e x13o
```

```
% As funções f1 e f2 são definidas como
```

```
% function[f1] = f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8, x13, m1, n1, r, r1)
```

```
% function[f2] = f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8, x13, m1, n1, r1, r2)
```

```
% x4=((sqrt((C1 + C5 * sqrt(x8))^2+8 * m1 * x13 * (1 + C9 * sqrt(x8)))-(C1 +C5 *
sqrt(x8))) / (4* (1 + C9 * sqrt(x8))))^2;
```

```
% x6 = n1 * x13 / (1 + C10 * sqrt(x8));
```

```
% x11 = (sqrt( (C3 + C7 * sqrt(x8))^2 / 16 + r1 * x13) - (C3 + C7 * sqrt(x8)) / 4)^2;
```

```
% f1 = sqrt(x4) * C5 * sqrt(x8) + x4 * C9 * sqrt(x8) + x6 * (1+2 * C10 * sqrt(x8)) +
sqrt(x11) * C7 * sqrt(x8) + C2 * sqrt(x8) + 2 * x8 - 2 * r * x13;
```

```
% Na primeira iteração, quando i=0, as derivadas aproximadas são calculadas como
```

```
% df/dx = (f(xo+dx, yo) - f(xo-dx, yo)) / 2dx
```

```
% df/dxy= (f(xo, yo+dy) - f(xo, yo-dy)) / 2dy
```

```
% e o Jacobiano calculado a partir delas; f pode ser f1 ou f2, x é x8 e y é x13!
```

```
% df1/dx8 = (f1(x8o+dx8, x13o) - f1(x8o-dx8, x13o)) / 2dx8
```

```
% df1/dx13= (f1(x8o, x13o+dx13) - f1(x8o, x13o-dx13)) / 2dx13
```

```

% df2/dx8 = (f2(x8o+dx8, x13o) - f2(x8o-dx8, x13o)) / 2dx8

% df2/dx13= (f2(x8o, x13o+dx13) - f2(x8o, x13o-dx13)) / 2dx13

% Lembrando a definição de f1 function[f1] = f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8, x13,
m1, n1, r, r1), e que o símbolo / não é válido em uma variável do Matlab, substituímos
df1/dx8 por df1_dx8 conforme segue:

i = 1; % inicialização da rotina % não pode começar do zero porque o Matlab não aceita
índice 0 em matrizes!

% Definição dos vetores x8 e x13

x8= [x8o 0 0 0 0 0 0 0 0 0]';
x13= [x13o 0 0 0 0 0 0 0 0 0]'; % vetores coluna para facilitar a visualização dos
resultados

delta_x8 = 1;
delta_x13 = 1; % atribuição de um valor inicial qualquer a delta_x8 e delta_x13 para não
provocar erro quando a próxima linha chamar estas variáveis por estarem indefinidas

% Definição dos diferenciais dx8 e dx13 para o cálculo das derivadas na primeira iteração

dx8 = 0.1 * x8o;
dx13 = 0.1 * x13o;

while ((abs(delta_x8)>1e-10) & (abs(delta_x13)>1e-10))

if (i==1) % primeira iteração

df1_dx8 = (f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8o+dx8, x13o, m1, n1, r, r1) - f1(C1, C2, C3,
C5, C7, C9, C10, x8o-dx8, x13o, m1, n1, r, r1)) / (2 * dx8);

df1_dx13 = (f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8o, x13o+dx13, m1, n1, r, r1) - f1(C1, C2,
C3, C5, C7, C9, C10, x8o, x13o-dx13, m1, n1, r, r1)) / (2 * dx13);

df2_dx8 = (f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8o+dx8, x13o, m1, n1, r1, r2) - f2(C1, C2,
C3, C5, C7, C9, C10, x8o-dx8, x13o, m1, n1, r1, r2)) / (2 * dx8);

df2_dx13 = (f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8o, x13o+dx13, m1, n1, r1, r2) - f2(C1, C2,
C3, C5, C7, C9, C10, x8o, x13o-dx13, m1, n1, r1, r2)) / (2 * dx13);

else % demais iterações

% A partir daí, as derivadas são aproximadas pela secante. As funções f1 e f2 são funções
de outras variáveis também, além de x8 e x13, assim sendo estas também devem ser
passadas como parâmetros de entrada.

```

```

% df/dx = f(x(i),y(i))-f(x(i-1),y(i)) / (x(i)-x(i-1))

% df/dy = f(y(i),y(i))-f(y(i-1),y(i)) / (y(i)-y(i-1))

% e o Jacobiano calculado a partir delas; f pode ser f1 ou f2, x é x8 e y é x13!

% function[f1] = f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8, x13, m1, n1, r, r1)

% function[f2] = f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8, x13, m1, n1, r1, r2)

% df1/dx8 = (f1(x8(i),x13(i))-f1(x8(i-1),x13(i))) / (x8(i)-x8(i-1))

% df1/dx13 = (f1(x8(i),x13(i))-f1(x8(i),x13(i-1))) / (x13(i)-x13(i-1))

% df2/dx8 = (f2(x8(i),x13(i))-f2(x8(i-1),x13(i))) / (x8(i)-x8(i-1))

% df2/dx13 = (f2(x13(i),x13(i))-f2(x13(i-1),x13(i))) / (x13(i)-x13(i-1))

df1_dx8 = (f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8(i), x13(i), m1, n1, r, r1) - f1(C1, C2, C3, C5,
C7, C9, C10, x8(i-1), x13(i), m1, n1, r, r1))/ (x8(i)-x8(i-1));

df1_dx13 = (f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8(i), x13(i), m1, n1, r, r1)- f1(C1, C2, C3, C5,
C7, C9, C10, x8(i), x13(i-1), m1, n1, r, r1))/ (x13(i)-x13(i-1));

df2_dx8 = (f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8(i), x13(i), m1, n1, r, r1) - f2(C1, C2, C3, C5,
C7, C9, C10, x8(i-1), x13(i), m1, n1, r, r1))/ (x8(i)-x8(i-1));

df2_dx13 = (f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8(i), x13(i), m1, n1, r, r1)- f2(C1, C2, C3, C5,
C7, C9, C10, x8(i), x13(i-1), m1, n1, r, r1))/ (x13(i)-x13(i-1));

end %if

Jacobian = [ df1_dx8 df1_dx13;
             df2_dx8 df2_dx13 ];

% definição do Jacobiano, não pode ser definido como J porque este é um nome
reservado do Matlab, usado para definir o número imaginário sqrt(-1)

y1 = f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8(i), x13(i), m1, n1, r, r1);

y2 = f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8(i), x13(i), m1, n1, r1, r2);

delta = inv(Jacobian) * [-y1 -y2]'; % matriz coluna onde o 1º. elemento é delta x8 e o
segundo é delta x13

delta_x8 = delta(1);
delta_x13 = delta(2);

```

```

% Cálculo dos próximos valores de x8 e x13

% Estas declarações if são necessárias para garantir a convergência, valores de x8 ou x13
% menores que 0 provocariam erro ao extrair sua raiz quadrada nos passos
% seguintes.

x8(i+1) = x8(i) + delta_x8;

if (x8(i+1)<0)
    x8(i+1)=0;
end

x13(i+1) = x13(i) + delta_x13;

if (x13(i+1)<0)
    x13(i+1)=0;
end

i = i+1; % incrementa i

end % while

x8 = x8(i);
x13 = x13(i); % atribui o último valor da iteração às variáveis x8 e x13

% Cálculo dos valores de x restantes

% Primeiro são calculados os valores de x4, x6 e x11, a partir dos valores de x8 e x13
encontrados ao final da rotina acima.

x4=((sqrt((C1 + C5 * sqrt(x8))^2+8 * m1 * x13 * (1 + C9 * sqrt(x8)))-(C1 +C5 * sqrt(x8)))
/ (4* (1 + C9 * sqrt(x8))))^2;

x6 = n1 * x13 / (1 + C10 * sqrt(x8));

x11 = (sqrt( (C3 + C7 * sqrt(x8))^2 / 16 + r1 * x13) - (C3 + C7 * sqrt(x8)) / 4)^2;

% e a seguir os demais valores de x

x1 = Kp1 * sqrt(x4) / sqrt(p/po);

x2 = Kp2 * sqrt(x8) / sqrt(p/po);

x3 = Kp3 * sqrt(x11) / sqrt(p/po);

x5 = Kp5 * sqrt(x4 * x8);

x7 = Kp7 * sqrt(x11 * x8);

```

```

x9 = Kp9 * sqrt(p/po) * x4 * sqrt(x8);
x10 = Kp10 * sqrt(p/po) * x6 * sqrt(x8);
x12 = r2 * x13;

% Definição do vetor x cujos elementos sao as frações molares xi
x = [x1 x2 x3 x4 x5 x6 x7 x8 x9 x10 x11 x12 x13];

% Verificação do somatório de xi, deve ser igual a 1
% x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6 + x7 + x8 + x9 + x10 + x11 + x12;

% Definição das funções f1 e f2, gravadas à parte como arquivos .m
% function[f1] = f1(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8, x13, m1, n1, r, r1)

% x4=((sqrt((C1 + C5 * sqrt(x8))^2+8 * m1 * x13 * (1 + C9 * sqrt(x8)))-(C1 +C5 *
sqrt(x8))) / (4* (1 + C9 * sqrt(x8))))^2;

% x6 = n1 * x13 / (1 + C10 * sqrt(x8));

% x11 = (sqrt( (C3 + C7 * sqrt(x8))^2 / 16 + r1 * x13) - (C3 + C7 * sqrt(x8)) / 4)^2;

% f1 = sqrt(x4) * C5 * sqrt(x8) + x4 * C9 * sqrt(x8) + x6 * (1+2 * C10 * sqrt(x8)) +
sqrt(x11) * C7 * sqrt(x8) + C2 * sqrt(x8) + 2 * x8 - 2 * r * x13;

% function[f2] = f2(C1, C2, C3, C5, C7, C9, C10, x8, x13, m1, n1, r1, r2)

% f2 = sqrt(x4) * (C1 + C5 * sqrt(x8)) + x4 * (1 + C9 * sqrt(x8)) + x6 * (1 + C10 *
sqrt(x8))+ sqrt(x11) * (C3 + C7 * sqrt(x8)) + x11 + C2 * sqrt(x8) + x8 + r2 * x13 - 1;

% Nesta linha termina a função propterm original, com a declaração end.

% A partir desta linha, e efetuado o calculo das derivadas das frações molares. Para calcular
estas, e necessario conhecer primeiro os valores das frações molares x, daí a posição do
calculo destas no fim da rotina

% Cálculo das derivadas de f1 e f2 em relação a à temperatura T e à pressão p

% Para calcular estas, é necessário conhecer primeiro as derivadas de f1 e f2 em relação a
C.

% Cálculo das derivadas de f1 em relação a C:

% Primeiro sao definidas as derivadas cujo valor é zero

```

```
df1_dC4 = 0;
df1_dC6 = 0;
df1_dC8 = 0;
```

% e a seguir as demais, não nulas:

% Definição das variáveis auxiliares, que são blocos que se repetem permitindo simplificar as equações

```
A = C1 + C5 * sqrt(x8);
B = C3 + C7 * sqrt(x8);
C = 1 + C9 * sqrt(x8);
D = sqrt(A^2 + 8*m1*x13*C);
E = sqrt(B^2 + 16*r1*x13);
F = 1 + C10 * sqrt(x8);
```

```
dx4_dC1 = -(A-D)^2 / (8 * D * C^2);
```

```
df1_dC1 = (A - D) * (2*C*C5 - C9*(A - D)) * sqrt(x8) / 8 / C^2 / D; % diferencial total de f1
```

```
df1_dC2 = sqrt(x8); % ok
```

```
dx11_dC3 = -(B-E)^2 / (8 * E);
```

```
df1_dC3 = 1/4 * C7 * (-1 + B/E) * sqrt(x8);
```

```
df1_dC5 = -(A - D) * (2*C * (D - C5 * sqrt(x8)) + C9 * (A - D) * sqrt(x8)) * sqrt(x8) / 8 / C^2 / D; % diferencial total de f1
```

```
dx11_dC7 = -(B-E)^2 * sqrt(x8) / (8 * E);
```

```
df1_dC7 = (-B + E)/4 * sqrt(x8) + C7/4 * (-1 + B) * x8;
```

```
dx4_dC9 = sqrt(x8) / (8 * C^3) * (D - A) * (A - (A^2 + 4 * C * m1 * x13) / D);
```

```
df1_dC9 = (-A + D)^2 * sqrt(x8) / 16 / C^2 + (-C5 * (-A + D) / 4 / C^2 - C9 * (-A + D)^2 / 8 / C^3) * x8 + (C5 / C / D + C9 * (-A + D) / 2 / C^2 / D) * m1 * x13 * x8;
```

```
dx6_dC10 = - n1 * x13 * sqrt(x8) / (1 + C10 * sqrt(x8))^2;
```

```
df1_dC10 = n1 * x13 * sqrt(x8) / (1 + C10 * sqrt(x8))^2;
```

% Definição do vetor df1_dC, derivadas parciais de f1 em relação aos elementos do vetor C

```
df1_dCp = [df1_dC1, df1_dC2, df1_dC3, 0, df1_dC5, 0, df1_dC7, 0, df1_dC9, df1_dC10];
```

% Cálculo das derivadas de f2 em relação a C. Repetindo o procedimento para o cálculo das derivadas de f1, são definidas primeiro as derivadas nulas

```
df2_dC4 = 0;
df2_dC6 = 0;
df2_dC8 = 0;
```

% e depois as diferentes de zero

% As mesmas variáveis auxiliares A, B, C, D, E definidas anteriormente são usadas para simplificar as equações.

% As derivadas de f2 em relação a Ci são:

```
df2_dC1 = (A-D)^2 /8/C/D;
```

```
df2_dC2 = sqrt(x8); % ok
```

```
df2_dC3 = -(B - E)^2 * (B + 2*sqrt(x11)) /16 /E /sqrt(x11) + sqrt(x11); % 20jan09
Diferencial total de f2
```

```
df2_dC5 = 1/8 * ( (A - D) * (D - A) * (C + A /2 /sqrt(x4)) /C^2 /D + 8*sqrt(x4) ) *
sqrt(x8); % 20jan09 Diferencial total de f2
```

```
df2_dC7 = -(B - E)^2 * (B + 2*sqrt(x11)) /E + 16*x11) * sqrt(x8) /16 /sqrt(x11); %
20jan09 Diferencial total de f2
```

```
df2_dC9 = (D - A) * ( (A - D) /8 /C^3 + m1*x13 /2 /C^2 /D ) * (C + A /2 /sqrt(x4)) *
sqrt(x8) + x4 * sqrt(x8); % 20jan09 Diferencial total de f2
```

```
df2_dC10 = x6 * sqrt(x8) - n1*x13*sqrt(x8) / (1 + C10 * sqrt(x8)); % 20jan09 Diferencial
total de f2
```

% Definição do vetor df2_dC, derivadas parciais de f2 em relação aos elementos do vetor C

```
df2_dCp= [df2_dC1, df2_dC2, df2_dC3, 0, df2_dC5, 0, df2_dC7, 0, df2_dC9, df2_dC10];
```

```
deltaf1t = dot(df1_dCp, dCp_dt);
deltaf2t = dot(df2_dCp, dCp_dt);
```

```
deltaf1p = dot(df1_dCp, dCp_dp);
deltaf2p = dot(df2_dCp, dCp_dp);
```

```
% df1/dt = df1_dC2 * dC2_dt + df1_dC5 * dC5_dt + df1_dC7 * dC7_dt + df1_dC9 *
dC9_dt + df1_dC10 * dC10_dt + df1_dx8 * dx8_dt + df1_dx13 * dx13_dt;
```

```
% df2/dt = df1_dC1 * dC1_dt + df2_dC2 * dC2_dt + df2_dC5 * dC5_dt + df2_dC7 *
dC7_dt + df2_dC10 * dC10_dt + df2_dx8 * dx8_dt + df2_dC9 * dC9_dt + df2_dx13 *
dx13_dt;
```

% df1/dp = df1_dC2 * dC2_dp + df1_dC5 * dC5_dp + df1_dC7 * dC7_dp + df1_dC9 * dC9_dp + df1_dC10 * dC10_dp + df1_dx8 * dx8_dp + df1_dx13 * dx13_dp;

% df2/dp = df1_dC1 * dC1_dp + df2_dC2 * dC2_dp + df2_dC5 * dC5_dp + df2_dC7 * dC7_dp + df2_dC10 * dC10_dp + df2_dx8 * dx8_dp + df2_dC9 * dC9_dp + df2_dx13 * dx13_dp;

% Estes são os sistemas de equações a serem resolvidos

% df1/dt = deltaf1t + df1_dx8 . dx8_dt + df1_dx13 . dx13_dt = 0 (2.28)

% df2/dt = deltaf2t + df2_dx8 . dx8_dt + df2_dx13 . dx13_dt = 0 (2.29)

% ou

$$\begin{array}{ccc|ccc} \% & |df1_dx8 & df1_dx13| & |dx8_dt| & & |-\delta f1t| \\ \% & |df2_dx8 & df2_dx13| & |dx13_dt| & = & |-\delta f2t| \end{array}$$

% As incognitas dx8_dt e dx13_dt sao encontradas pela inversao da matriz df/dx

% Antes de definir as derivadas de f1 e f2 em relação a x8 e x13, e necessario definir as derivadas de x4, x6, x11 em relação a x8 x13

% Definição das derivadas de x4, x6 e x11 em relação a x8 e x13, necessárias para o cálculo de df_dx, dx_dt e dx_dp

dx4_dx8 = (-A^2*(C9 /8 /C^3 + C5 /16 /C^2 /D) - (C5*D /16 /C^2 + C9*m1*x13 /4 /C^2) + A * (C5 /8 /C^2 + C9*D /8 /C^3 - C9 *m1 *x13 /4 /C^2 /D)) /sqrt(x8);

dx4_dx13 = m1*(D-A)/2/D/C; % certa

dx6_dx8 = C10*n1*x13/2/(1 + C10*sqrt(x8))^2/sqrt(x8);

dx6_dx13 = n1/(1 + C10*sqrt(x8)); % certa

dx11_dx8 = C7 * (B-E)^2/16/E/sqrt(x8);

dx11_dx13 = r1 * (E-B)/E;

% Definição das derivadas de f1 e f2 em relação a x8 e x13

A1 = -C9^2 * (A - D)^2 /C^3 + 2*C5 * (C5 * (-1 + A/D) + 4*C9*m1*x13 /D + (-A + D) /sqrt(x8)) /C - C9 * (A - D) * (-A*D + D^2 + 2*A*C5*sqrt(x8) - 6*C5*D*sqrt(x8) + 8*C9*m1*x13*sqrt(x8)) /2 /C^2 /D /sqrt(x8);

A2 = 2* (C7^2 * (-1 + B/E) + C7 * (-B + E) /sqrt(x8) + 4 * (C10*n1*x13 + C2*(1 + C10*sqrt(x8))^2 + 4*sqrt(x8) + 8*C10*x8 + 4*C10^2 * x8^(3/2)) / (1 + C10*sqrt(x8))^2 /sqrt(x8));

df1_dx8 = 1/16 * (A1 + A2);

$$df1_dx13 = n1 - 2*r + (-A*C9 + 2*C5*C + C9*D)*m1*\sqrt{x8} / 2/C/D + (C10*E*n1 + 2*C7*F*r1)*\sqrt{x8} / E / F;$$

$$A1 = (C5 * (4*C1*C5 - C1^2*C9 - 2*C5*D) * E + 2*C^2*D * (C7^2 * (2*C3 - E) + 8*E) - 4*C9 * (-3*C5 + C1*C9) * E*m1*x13) / 16 / C^2 / D / E;$$

$$A2 = ((2*C5 - C1*C9) * E * (C1^2 - C1*D + 4*m1*x13) + 2*C^2*D * (4*C2*E + C7 * (C3^2 - C3*E + 8*r1*x13))) / 16 / C^2 / D / E / \sqrt{x8};$$

$$A3 = (2*C^2*C7^3*D + C5*E * (2*C5^2 + C5*C9*(C1-D) + 4*C9^2 * m1 * x13)) * \sqrt{x8} / 16 / C^2 / D / E;$$

$$A4 = C5^3 * C9 * x8 / 16 / C^2 / D;$$

$$df2_dx8 = A1 + A2 + A3 + A4;$$

$$df2_dx13 = n1 + r2 + (E - B) * r1 * (B + 2*\sqrt{x11}) / 2 / E / \sqrt{x11} + (D - A) * m1 * (C + A / 2 / \sqrt{x4}) / 2 / C / D; \% desativada em 20jan09 para testar a derivada numerica$$

$$\text{Jacobian} = \begin{bmatrix} df1_dx8 & df1_dx13; \\ df2_dx8 & df2_dx13; \end{bmatrix};$$

$$Y = \text{inv}(\text{Jacobian}) * \begin{bmatrix} -\text{deltaf1t}; \\ -\text{deltaf2t} \end{bmatrix};$$

$$dx8_dt = Y(1);$$

$$dx13_dt = Y(2);$$

% De forma semelhante, o sistema

$$\% \text{deltaf1p} + df1_dx8 . dx8_dp + df1_dx13 . dx13_dp = 0$$

$$\% \text{deltaf2p} + df2_dx8 . dx8_dp + df2_dx13 . dx13_dp = 0$$

% deve ser resolvido para dx8_dp e dx13_dp, o que também é feito por inversão da matriz,

$$\text{Jacobian} = \begin{bmatrix} df1_dx8 & df1_dx13; \\ df2_dx8 & df2_dx13; \end{bmatrix};$$

$$Y = \text{inv}(\text{Jacobian}) * \begin{bmatrix} -\text{deltaf1p}; \\ -\text{deltaf2p} \end{bmatrix};$$

$$dx8_dp = Y(1);$$

$$dx13_dp = Y(2);$$

% Derivadas de x4 em relação a C1 C5 C9 x8 x13

$$dx4_dC1 = -(A-D)^2 / 8 / D / C^2;$$

```

dx4_dC5 = -(A-D)^2 * sqrt(x8) /8 /C^2 /D;

dx4_dC9 = ((-A + D)*(A - D + 4*m1*x13*C/D)*sqrt(x8))/8/C^3; % a linha abaixo esta
mais simples mas da o mesmo resultado

dx4_dx8 = (-A^2*(C9 /8 /C^3 + C5 /16 /C^2 /D) - (C5*D /16 /C^2 + C9*m1*x13 /4
/C^2) + A * (C5 /8 /C^2 + C9*D /8 /C^3 - C9 *m1 *x13 /4 /C^2 /D)) /sqrt(x8); %
corrigida em 22jan09

dx4_dx13 = (-A + D) * m1 /2 /C /D; % certa em 22jan09

dx4_dt = dx4_dC1 * dC1_dt + dx4_dC5 * dC5_dt + dx4_dC9 * dC9_dt + dx4_dx8 *
dx8_dt + dx4_dx13 * dx13_dt;

dx6_dC10 = - n1*x13*sqrt(x8) /F^2;

dx6_dx8 = -C10*n1*x13 /2 /F^2 /sqrt(x8);

dx6_dx13 = n1 /F;

dx6_dt = (n1*dx13_dt)/F - n1 * x13 /F^2 * (sqrt(x8) * dC10_dt + C10 /2 /sqrt(x8) *
dx8_dt);

dx11_dC3 = -(B-E)^2 /8 /E;

dx11_dC7 = -(B-E)^2 * sqrt(x8) /8 /E;

dx11_dx8 = -C7 * (B-E)^2 /16 /E /sqrt(x8);

dx11_dx13= r1 * (-B + E) /E;

dx11_dt = dx11_dC3 * dCp_dt(3) + dx11_dC7 * dCp_dt(7) + dx11_dx8 * dx8_dt +
dx11_dx13 * dx13_dt;

dx12_dt = r2 * dx13_dt;

% Cálculo das demais derivadas dx_dt

dx1_dt = sqrt(x4)*dC1_dt + C1*dx4_dt/2/sqrt(x4);

dx2_dt = C2*dx8_dt/2/sqrt(x8) + dC2_dt*sqrt(x8);

dx3_dt = sqrt(x11)*dC3_dt + C3*dx11_dt/2/sqrt(x11);

dx5_dt = sqrt(x4*x8)*dC5_dt + C5*(x8*dx4_dt + x4*dx8_dt)/2/sqrt(x4*x8);

dx7_dt = sqrt(x11*x8)*dC7_dt + C7*(x8*dx11_dt + x11*dx8_dt)/2/sqrt(x11*x8);

```

$$dx9_dt = x4*sqrt(x8)*dC9_dt + C9*sqrt(x8)*dx4_dt + C9*x4*dx8_dt/2/sqrt(x8);$$

$$dx10_dt = x6*sqrt(x8)*dC10_dt + C10*sqrt(x8)*dx6_dt + C10*x6/2/sqrt(x8)*dx8_dt;$$

$$dx12_dt = r2 * dx13_dt;$$

% Definição do vetor dx_dt cujos elementos são as derivadas das frações molares xi em relação a temperatura reduzida t

$$dx_dt = [dx1_dt, dx2_dt, dx3_dt, dx4_dt, dx5_dt, dx6_dt, dx7_dt, dx8_dt, dx9_dt, dx10_dt, dx11_dt, dx12_dt, dx13_dt];$$

% Cálculo das derivadas das frações molares x4, x6, x11, x12 em relação à pressão p

$$dx4_dp = dx4_dC1 * dC1_dp + dx4_dC5 * dC5_dp + dx4_dC9 * dC9_dp + dx4_dx8 * dx8_dp + dx4_dx13 * dx13_dp;$$

$$dx6_dp = -n1*x13*sqrt(x8)/F^2 * dC10_dp + n1/F * dx13_dp - C10*n1*x13/2/F^2/sqrt(x8) * dx8_dp;$$

$$dx11_dp = -(B-E)^2*dC3_dp /8/E * dC3_dp - (B-E)^2*sqrt(x8) /8/E * dC7_dp - C7*(B-E)^2/16/E/sqrt(x8) * dx8_dp + r1*(E-B)/E * dx13_dp;$$

$$dx12_dp = r2 * dx13_dp;$$

% Cálculo das derivadas dx_dp restantes

$$dx1_dp = (A-D)*(C1-D)/4/C/D * dC1_dp + C1*(A/D-1)*sqrt(x8)/4/C * dC5_dp + C1*(A-D+4*m1*x13*C/D)*sqrt(x8)/4/C^2 * dC9_dp + C1 * ((C5-C1*C9)*(A-D)-4*C9*m1*x13*C)/8/C^2/D/sqrt(x8) * dx8_dp + C1*m1/D * dx13_dp;$$

$$dx2_dp = (-Kp2 * x8 + Kp2 * p * dx8_dp)/(2*p*sqrt(p/po*x8));$$

$$dx3_dp = (-Kp3 * x11 + Kp3 * p * dx11_dp)/(2*p*sqrt(p/po*x11));$$

$$dx5_dp = (Kp5 * (x4 * dx8_dp + dx4_dp * x8))/(2*sqrt(x4*x8));$$

$$dx7_dp = Kp7*(x8 * dx11_dp + dx8_dp * x11)/(2*sqrt(x8*x11));$$

$$dx9_dp = 1/(2 * po * sqrt(x8)) * (Kp9 * sqrt(po/p) * (2 * p * x8 * dx4_dp + x4 * (x8 + p * dx8_dp)));$$

$$dx10_dp = 1/(2 * po * sqrt(x8)) * (Kp10 * sqrt(po/p) * (2 * p * x8 * dx6_dp + x6 * (x8 + p * dx8_dp)));$$

```
% Definição do vetor dx_dp
```

```
dx_dp = [dx1_dp, dx2_dp, dx3_dp, dx4_dp, dx5_dp, dx6_dp, dx7_dp, dx8_dp, dx9_dp,  
dx10_dp, dx11_dp, dx12_dp, dx13_dp];
```

Anexo D

Propriedades geométricas e cinemáticas

As propriedades geométricas e cinemáticas do cilindro e do mecanismo biela-manivela foram descritas detalhadamente por Heywood (Heywood, 1989). A Figura D.1 mostra a geometria do cilindro e as variáveis utilizadas na dedução das equações.

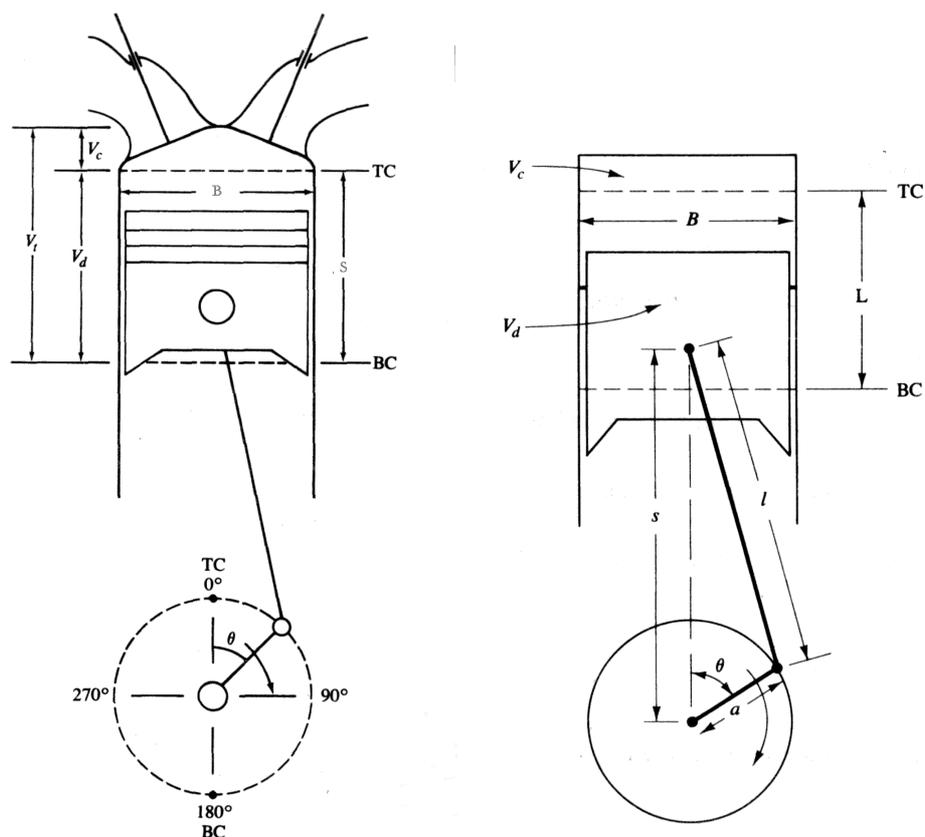


Figura D.1: Geometria e cinemática do mecanismo pistão-biela-manivela (Heywood, 1989).

Evolução do volume e da área das paredes internas do cilindro

A área instantânea das paredes internas A do cilindro, é dada pela equação:

$$A(\theta) = A_{ch} + A_p + \frac{\pi B L}{2} \left(\frac{L}{a} + 1 - \cos \theta - \sqrt{\left(\frac{L}{a}\right)^2 - \sin^2 \theta} \right) \quad (1)$$

onde

A_{ch} é a área da superfície da câmara de combustão correspondente ao cabeçote

A_p é a área da superfície da coroa do pistão

B é o diâmetro do cilindro;

L é a distância entre centros da biela;

a é o raio da manivela do virabrequim, igual à metade do curso do pistão S ;

θ é o ângulo da manivela do virabrequim em relação ao PMS, no sentido horário, rad.

O valor da área $A(\theta)$ varia entre os limites mínimo A_{ch} quando $\theta = 0$ e máximo A_{max} , dado por $A_{max} = A_{ch} + A_p + \pi B L$, quando $\theta = \pi$.

Para o motor CFR, cuja câmara de combustão é cilíndrica, A_{ch} é dada pela fórmula:

$$A_{ch} = \pi B \left(\frac{L}{r_c - 1} + \frac{B}{4} \right) \quad (2)$$

sendo r_c a taxa de compressão, adimensional. Para o motor CFR, cujo topo do pistão é plano, A_p é dado por:

$$A_p = \frac{\pi B^2}{4} \quad (3)$$

Assim, o volume instantâneo V do pistão é uma função da posição angular θ do virabrequim. O volume instantâneo $V(\theta)$ é descrito pela equação:

$$V(\theta) = \left(1 + \frac{1}{2} (r_c - 1) \left(1 + \frac{L}{a} - \cos \theta - \sqrt{\left(\frac{L}{a}\right)^2 - \sin^2 \theta} \right) \right) V_c \quad (4)$$

O valor da razão $V(\theta)/V_c$ varia entre os limites 1 e r_c , onde V_c é o volume da câmara de combustão.

O diferencial do volume interno do cilindro $dV(\theta)$ é dado por:

$$dV(\theta) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\cos\theta}{\sqrt{\left(\frac{L}{a}\right)^2 - \sin^2\theta}} \right) (r_c - 1) \sin\theta V_c d\theta \quad (5)$$

onde $d\theta$ é o diferencial da posição angular dado por ωdt , sendo ω a velocidade angular do virabrequim em rad/s e dt o diferencial de tempo em s.

A Figura D.2 mostra a razão entre o volume instantâneo $V(\theta)$ e o volume máximo V_{\max} do cilindro V_{r_c} , bem como a razão entre a área instantânea $A(\theta)$ e a área máxima A_{\max} das paredes do cilindro, para o motor CFR com taxa de compressão igual a 8:1.

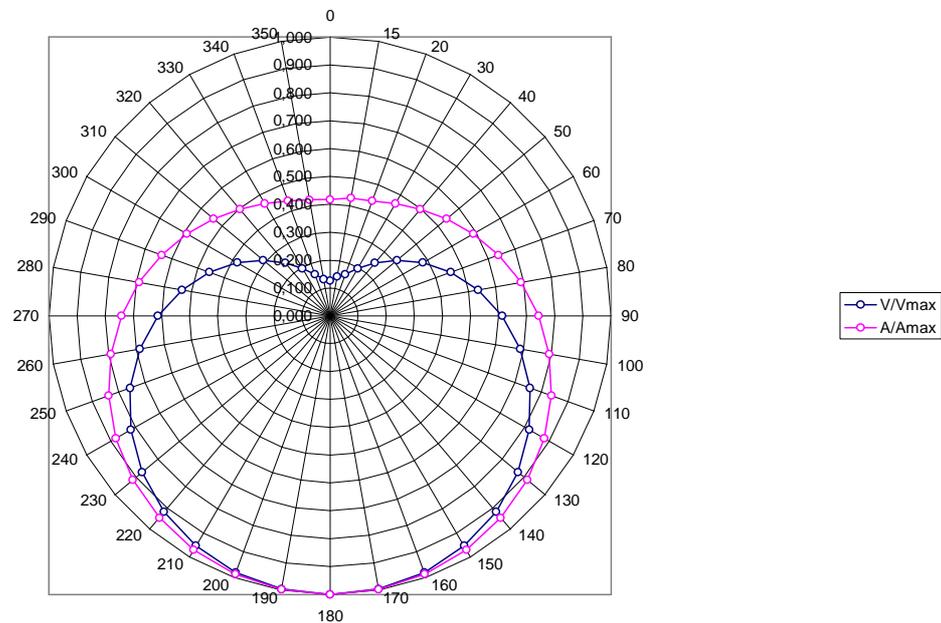


Figura D.2: Gráfico polar da razão entre o volume instantâneo $V(\theta)$ e o volume máximo V_{\max} do cilindro e da razão entre a área instantânea $A(\theta)$ e a área máxima A_{\max} das paredes do cilindro (motor CFR com taxa de compressão igual a 8:1).

Anexo E

Modelo completo do ciclo Otto

% Simulação do escapamento, admissão e compressão

% Verificada em 8jan2010

% Verificada até a compressão do terceiro ciclo em 29jan2010 às 9:59

% Verificada até a combustão do quarto ciclo em 20fev2010 no Cristal

% Definição da constante universal dos gases

R = 8.314472; % J/mol

% Definição das propriedades do ar atmosférico

T_int = 298; % K, 298 corresponde à temperatura ambiente de 25 graus C

T_exh = 850; % K, % 850 K é um valor típico de temperatura de gases no escapamento para o CFR

% A partir do segundo ciclo isto passa a ser uma condição inicial gerada pela integração das propriedades dos gases de escapamento ao longo da exaustão do ciclo anterior

p_int = 1.013; % bar

ura = 0; % umidade relativa do ar atmosférico, %

xa = frac_mol_ar(p_int, T_int, ura);

air = [T_int, p_int, ura];

% Determinação das frações molares do ar atmosférico

xa_H2O = xa(9); % fração molar de H2O no ar atmosférico

alfa = 3.72787; % = número de moléculas de N2 para cada molécula de O2 no ar atmosférico

beta = 0.00182851; % = número de moléculas de CO2 para cada molécula de O2 no ar atmosférico

delta = 0.0445909; % = número de moléculas de Ar para cada molécula de O2 no ar atmosférico

gama = (1 + alfa + beta + delta) * xa_H2O / (1 - xa_H2O);

% = número de moléculas de H2O para cada molécula de O2 no ar atmosférico

abgd = [alfa beta gama delta];

% Definição das propriedades do combustível e da mistura

n = 8; m = 18; l = 0; k = 0; fi = 1;

fuel = [n, m, l, k, fi];

mw_f = (12.0107 * n + 1.00794 * m + 15.9994 * l); % massa molecular do combustível

ni = n + m/4 - l/2; % ou na_nf, coeficiente estequiométrico ni para não causar confusão com w, velocidade característica na formula de Woschni, não confundir l minúsculo na fórmula com L maiúsculo, comprimento da biela!

% Determinação da relação ar/combustível estequiométrica molar

na_nf = (n + m/4 - l/2) * (1+alfa+beta+gama+delta);

% Definição das propriedades dos gases de escapamento

T_exh = 850; % K, valor típico para o motor CFR

p_exh = 1.013;% bar

exh = [T_exh, p_exh];

% Estimativa das frações molares dos gases residuais no primeiro ciclo

x_H2O = xa(9);

% Estimativa inicial de x8o para a rotina proptermeq, em função de T_exh entre 900 e 1100 K e fi entre 0.9 e 1.1, para o isoctano e p = 3 bar

% Pode ser feita também pela função x8o

af = -27.7281605;

bf = 0.006020645;

cf = 18.45745337;

df = 0.990523742;

ef = -0.00995229;

% parâmetros renomeados de a, b, c, d, e, f para af, bf, cf, df, ef para não causar confusão com outros já definidos.

x8o = exp (af + bf*T_exh + cf*(1/2 + 1/pi *(atan((fi-df)/ef))));

[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n, m, l, k, fi, p_exh, T_exh, x_H2O, x8o);

xp = x(1:12);

molar_fractions = [xa, xp];

% Definição dos parâmetros do motor

```

L = 10 * 0.0254;      % comprimento da biela, m
B = 3.25 * 0.0254;   % diâmetro do pistão, m
S = 4.5 * 0.0254;    % curso do pistão, m
D_int = 34.19;       % diâmetro da válvula de admissão, mm
D_exh = 34.19;       % diâmetro da válvula de escapamento, mm

Tw = 373;            % temperatura das paredes do cilindro, K, igual a 100 graus C

rc = 6.01;          % taxa de compressão, adimensional

Vc = pi * B^2 / 4 * S / (rc-1);
Vd = pi * B^2 / 4 * S;

omega = 900 / 60 * 2 * pi; % velocidade angular do virabrequim, rad/s

engine = [omega, B, L, S, rc, Tw, D_int, D_exh];

% Definição dos parâmetros da função de Wiebe
a_w = 5;
m_w = 2;
teta_spk = -18 * pi / 180;
teta_f = 50 * pi / 180;

flame = [a_w, m_w, teta_spk, teta_f];

% Determinação do número de mols no interior do cilindro no início do primeiro
ciclo
To = T_int;          % no início do primeiro ciclo o cilindro está preenchido por ar à
                    % temperatura ambiente

nao = 1e5 * p_int * (Vc+Vd) / R / To * na_nf / fi / (na_nf / fi + 1);
nfo = 1e5 * p_int * (Vc+Vd) / R / To / (na_nf / fi + 1);
npo = 0;             % não existem gases residuais no primeiro ciclo

% Definição do vetor de condições iniciais para a integração do modelo
exh_adm_comp pela rotina ode45

yo = [nao nfo npo To]; % vetor de condições iniciais

% Definição do vetor de parâmetros para esta rotina de integração

% engine = [omega, B, L, S, rc, Tw, D_int, D_exh];           % 1:8
% fuel = [n, m, l, k, fi];                                   % 9:13
% air = [T_int, p_int, ura];                                  % 14:16
% exh = [T_exh, p_exh];                                       % 17:18
% molar_fractions = [xa, xp];                                 % 19:42
% abgd = [alfa beta gama delta];

```

```
A2 = [engine, fuel, air, exh, molar_fractions, abgd];
```

```
% Definição dos limites de integração do primeiro ciclo
```

```
evo = 140 * pi / 180      % rad
```

```
teta_spk = -18 * pi / 180 % rad
```

```
tmin = -15*pi / omega;   % s
```

```
tmax = -12*pi/omega + teta_spk / omega; % s
```

```
% Rotina de integração de Runge-Kutta
```

```
% sol = ode45(@exh_adm_comp4, [tmin, tmax], yo);
```

```
% Interpolação dos tempos da rotina para determinar as variáveis de integração em intervalos iguais de tempo
```

```
% new_t=linspace(tmin,tmax,2501);
```

```
% Outra forma de chamar a rotina sem gerar uma structure, esta não permite interpolação mas se presta à comparação com os dados experimentais após o tratamento de ruídos pela série de Fourier, quando podem ser interpolados em qualquer valor de t e não mais necessariamente nos tempos amostrados pelo osciloscópio
```

```
% Integração do modelo exh_adm_comp no primeiro ciclo
```

```
[t, y] = ode45(@exh_adm_comp4, [tmin, tmax], yo, [], A2);
```

```
% [] é o 'placeholder for options', necessário à sintaxe do Matlab
```

```
% A2 é o vetor de parâmetros
```

```
% Definição dos vetores de resultados de integração na, nf, np, T – número de mols de ar, combustível, gases residuais, temperatura
```

```
na = y(:,1);
```

```
nf = y(:,2);
```

```
np = y(:,3);
```

```
T = y(:,4);
```

```
% [na nf np T] % exibe os resultados da integração do modelo exh_adm_comp
```

```
% Determinação dos vetores de posições angulares correspondentes aos tempos de integração da rotina ode45
```

```
teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad
```

```
teta_cam = teta_crank ./ 2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas, rad
```

% Determinação do vetor de volumes correspondentes aos tempos de integração da rotina ode45

a = S/2;

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank) - sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

% Determinação do vetor de pressões correspondentes aos tempos de integração da rotina ode45 no primeiro ciclo

p = 1e-5 * (na + nf + np) * R .* T ./V;

yeac1 = [na nf np p T T];

teac1 = t;

% *** Início do modelo de combustão *******

% Determinação das condições iniciais de integração do modelo de combustão do primeiro ciclo

last = length(t); % comprimento do vetor de resultados de integração do modelo
exh_adm_comp

po = p(last); % pressão inicial do modelo two_zone_model

Tuo = T(last); % temperatura inicial da mistura não queimada

to = t(last); % tempo inicial de integração

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, to, B, L, S, rc); % volume inicial do cilindro

% teste da função two_zone_model v3

% Este script executa a integração do modelo two_zone_model_v7 entre to e tmax e determina as condições iniciais e limites de integração do modelo exh_adm_comp4 do segundo ciclo

% A função round introduz pequenas diferenças em relação ao valor correto de to que impedem a singularidade da matriz. A no início da integração do modelo two_zone_model_v7

% Definição das constantes do modelo de combustão

% Determinação do volume inicial do cilindro

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, to, B, L, S, rc);

% Definição da abertura das válvulas

```
h_int = 0; % válvula de admissão fechada durante a combustão
h_exh = 0; % válvula de escapamento fechada durante a
combustão
```

% Determinação da relação ar/combustível estequiométrica molar no primeiro ciclo

```
na_nf = (n + m/4 - 1/2) * (1+alfa+beta+gama+delta);
```

% Determinação do número de mols no interior do cilindro no início da combustão do primeiro ciclo

% O número de mols foi definido como n_mols para evitar confusão com n, número de átomos de C na fórmula do combustível

```
n_mols = na(last) + nf(last) + np(last);
```

```
nao = na(last);
nfo = nf(last);
npo = np(last);
```

% Definição dos parâmetros do modelo de combustão do primeiro ciclo

```
% engine = [omega, B, L, S, rc, Tw, D_int, D_exh];
% flame = [a_w, m_w, teta_spk, teta_f];
% molar_fractions = [xa, xp];
% mole_contents = [nao, nfo, npo];
% fuel = [n, m, l, k, fi];
```

% Definição dos limites de integração do modelo de combustão no primeiro ciclo

```
tmin = to + 1e-4; % deslocamento no tempo para evitar divergência na integração do
modelo de combustão
```

```
tmax = tmin + (evo-teta_spk)/omega;
```

% Definição do vetor de condições iniciais do modelo de combustão no primeiro ciclo

```
x8o = 1e-9; % arbitrado por levar à convergência da função proptermeq
```

% Determinação da temperatura inicial dos gases de combustão

```
Tbo = Tb_o(n, m, l, k, fi, po, Tuo, ura, abgd);
```

% Determinação das frações molares iniciais dos gases de combustão

```
[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n, m, l, k, fi, po, Tbo, x_H2O, x8o);
```

```
yo = [po Tb0 Tu0 x(8) x(13)]; % vetor de condições iniciais do modelo de
combustão
```

% Definição dos parâmetros do modelo de combustão

```
A1 = [omega, B, L, S, rc, a_w, m_w, teta_spk, teta_f, po, Tu0, Vo, Tw, nao, nfo, npo, fuel,
xa, xp, abgd]; % matriz definida como A1 para não confundir com a área das paredes do
cilindro
```

% Integração do modelo de combustão do primeiro ciclo

```
[t, y] = ode45(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1);
```

```
% [t, y] = ode15s(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1)
```

```
% Nota: '[]' entre yo e A1 é necessário como 'placeholder' para options
```

% Definição dos vetores p, Tb, Tu; resultados da integração do modelo de combustão do primeiro ciclo

```
p = y(:,1);
Tb = y(:,2);
Tu = y(:,3);
xb8 = y(:,4);
xb13 = y(:,5);
```

% Definição dos vetores na, nf, np; determinados a partir da função de Wiebe e dos tempos de integração do modelo de combustão

```
last = length(t);
```

```
clear na nf np % necessário para permitir nova dimensão aos vetores na, nf, np
```

```
for i=1:last
    teta = omega * t(i);
    [fb, dfb_dteta] = Wiebe(a_w, m_w, teta, teta_spk, teta_f);
    na(i) = nao * (1-fb);
    nf(i) = nfo * (1-fb);
    np(i) = npo * (1-fb);
end % for
```

% na, nf, np são determinados como vetores linha, devem ser transpostos para se tornarem vetores coluna.

% Definição do vetor de resultados de integração do modelo de combustão do primeiro ciclo

```
ycomb1 = [na' nf' np' p Tb Tu];
tcomb1 = t;
```

% *** Final do modelo de combustão do primeiro ciclo *******

% Determinação das condições iniciais do modelo exh_adm_comp no segundo ciclo

last = length(t); % comprimento do vetor dos resultados da integração do modelo de combustão

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, tmax, B, L, S, rc); % Vo é o volume do cilindro ao final da combustão

npo = 1e5 * p(last) * Vo / R / Tb(last); % número inicial de mols de produtos da combustão na integração do modelo exh_adm_comp do próximo ciclo; p(last) e Tb(last) são a pressão e temperatura no interior do cilindro ao final da combustão.

nao = 0; % não existe ar no interior do cilindro ao final da combustão

nfo = 0; % não existe combustível no interior do cilindro ao final da combustão

To = Tb(last); % a temperatura inicial dos gases no próximo ciclo é igual à temperatura ao final da combustão

po = p(last);

% Determinação das frações molares xp dos gases residuais que estarão no interior do cilindro durante o segundo ciclo

x8o = xb8(last);

[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n, m, l, k, fi, po, To, x_H2O, 1e-9);

xp = x(1:12);

molar_fractions = [xa xp];

% Definição do vetor de condições iniciais para a integração do modelo exh_adm_comp no segundo ciclo

yo = [nao nfo npo To];

% Definição dos limites de integração do modelo exh_adm_comp no segundo ciclo

tmin = t(last); % não é necessário deslocamento para a convergência

tmax = tmin + (4*pi + teta_spk - evo) / omega;

% Concatenação dos vetores

y = [yeac1' ycomb1'];

```
t = [teac1' tcomb1'];
```

```
na = y(:,1);
```

```
nf = y(:,2);
```

```
np = y(:,3);
```

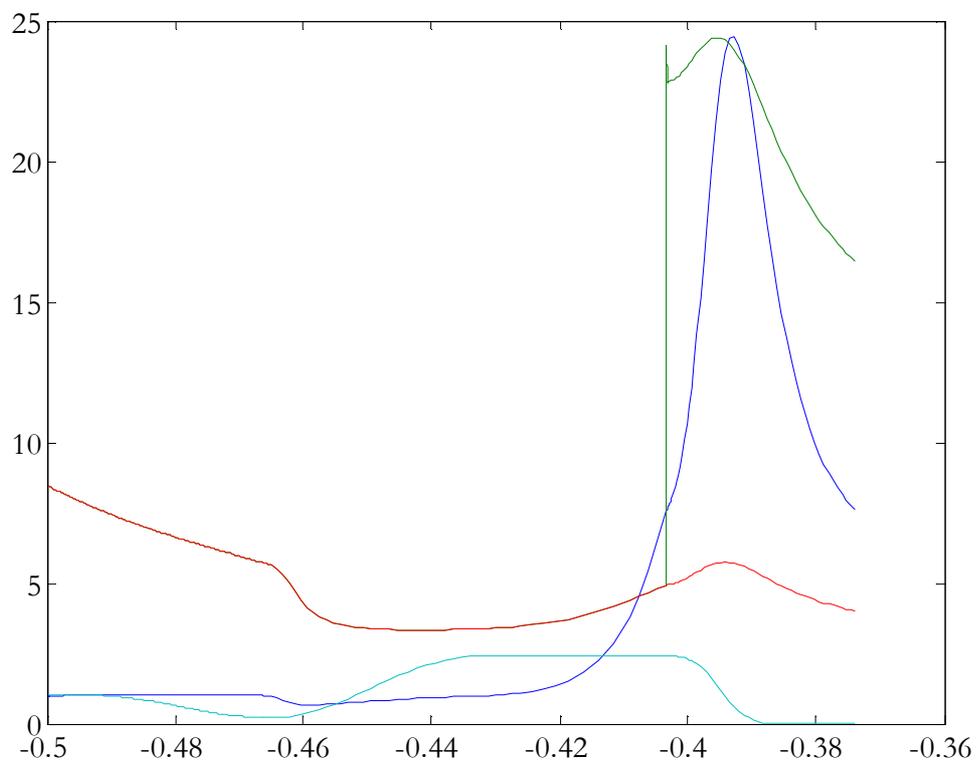
```
p = y(:,4);
```

```
Tb = y(:,5);
```

```
Tu = y(:,6);
```

% Exibição dos resultados na forma gráfica

```
% plot(t, p, t,Tb/100, t,Tu/100)
```



% Fig. E.1: pressão (azul), número de mols de ar (azul claro), temperatura da mistura fresca Tu (vermelho), temperatura dos gases de combustão Tb (verde), simulação do primeiro ciclo completo

% Definição dos parâmetros do modelo exh_adm_comp4 no segundo ciclo

```
A2 = [engine, fuel, air, exh, molar_fractions, abgd];
```

% Integração do modelo exh_adm_comp4 no segundo ciclo

```

[t, y] = ode45(@exh_adm_comp4, [tmin tmax], yo, [], A2);

clear na nf np          % necessário para permitir nova dimensão aos vetores na, nf, np

na = y(:, 1);
nf = y(:, 2);
np = y(:, 3);
T = y(:, 4);

% Determinação dos vetores de posições angulares correspondentes aos tempos de
integração da rotina ode45

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas,
rad

% Determinação do vetor de volumes

a = S/2;

clear V;

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank) - sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

% Determinação do vetor de pressões

p = 1e-5 * (na + nf + np) * R .* T ./ V;

% Gravação dos resultados

yeac2 = [na nf np p T T];

teac2 = t;

% Concatenação dos vetores de resultados

y = [yeac1; ycomb1; yeac2];

t = [teac1; tcomb1; teac2];

na = y(:,1);
nf = y(:,2);
np = y(:,3);
p = y(:,4);
Tb = y(:,5);
Tu = y(:,6);

% Determinação dos vetores de posições angulares

```

```

% teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

% teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de
válvulas, rad

% Determinação do vetor de volumes

% a = S/2;

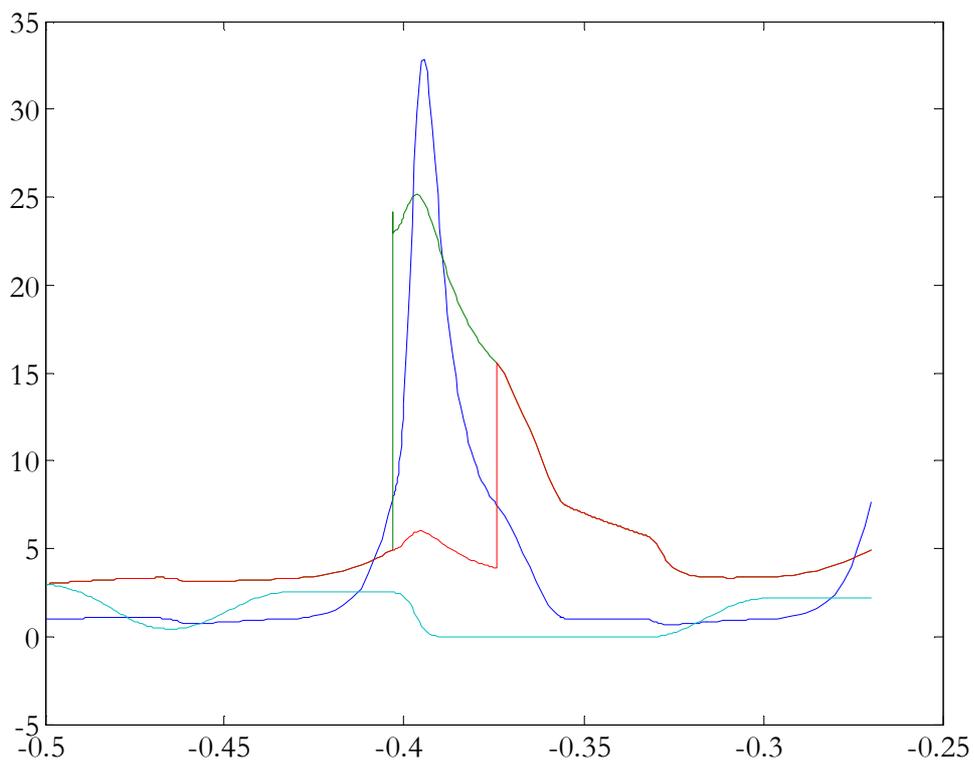
% clear V;

% V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank)- sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

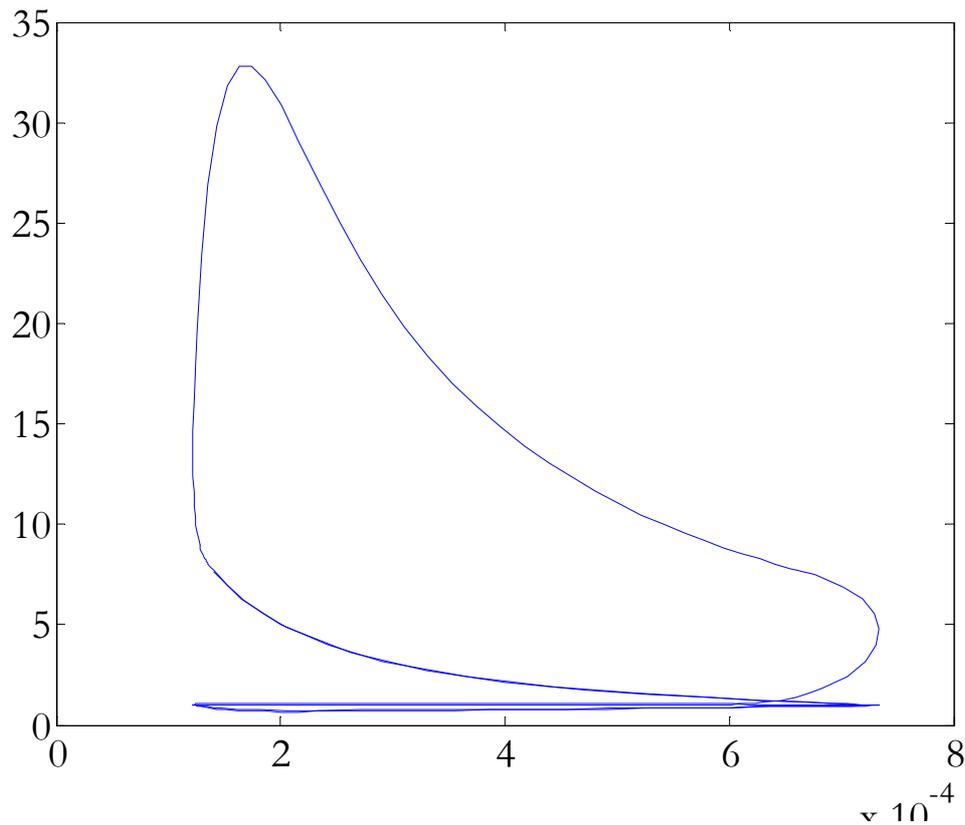
% Exibição dos resultados desde o primeiro até a compressão do segundo ciclo na
forma gráfica

% plot(t, p, t,Tb/100, t,Tu/100, t,na*100)

```



% Fig. E.2: pressão (azul), número de mols de ar (azul claro), temperatura da mistura fresca T_u (vermelho), temperatura dos gases de combustão T_b (verde), simulação do primeiro ciclo completo e da compressão do segundo ciclo.



% Fig. E.3: Diagrama p V do primeiro ciclo completo.

% *** Início do modelo de combustão do segundo ciclo *******

% Determinação das condições iniciais de integração do modelo de combustão do segundo ciclo

last = length(t); % comprimento do vetor de resultados de integração do modelo
exh_adm_comp

po = p(last); % pressão inicial do modelo two_zone_model
Tuo = Tu(last); % temperatura inicial da mistura não queimada
to = t(last); % tempo inicial de integração

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, to, B, L, S, rc); % volume inicial do cilindro

% teste da função two_zone_model v3

% Este script executa a integração do modelo two_zone_model_v7 entre to e tmax e determina as condições iniciais e limites de integração do modelo exh_adm_comp4 do segundo ciclo

% Definição das constantes do modelo de combustão

% Definição dos limites de integração do modelo de combustão do segundo ciclo

tmin = to + 1e-4; % deslocamento para permitir a convergência

tmax = tmin + (evo-teta_spk)/omega;

% Determinação do volume inicial do cilindro

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, tmin, B, L, S, rc);

% Definição da abertura das válvulas

h_int = 0; % válvula de admissão fechada durante a combustão
h_exh = 0; % válvula de escapamento fechada durante a
combustão

% Determinação do número de mols no interior do cilindro no início da combustão do segundo ciclo

% De acordo com a equação de estado dos gases ideais em base molar, $n_{\text{mols}} = p V / (R T)$

% O número de mols foi definido como n_mols para evitar confusão com n, número de átomos de C na fórmula do combustível

n_mols = na(last) + nf(last) + np(last);

nao = na(last);
nfo = nf(last);
npo = np(last);

% Definição dos parâmetros do modelo de combustão do segundo ciclo

% engine = [omega, B, L, S, rc, Tw, D_int, D_exh];
% flame = [a_w, m_w, teta_spk, teta_f];
% molar_fractions = [xa, xp];
% mole_contents = [nao, nfo, npo];
% fuel = [n, m, l, k, fi];

% Definição do vetor de condições iniciais do modelo de combustão do segundo ciclo

% Determinação dos valores da alfa1, beta1, gama1, delta1 da mistura de ar e gases residuais do primeiro ciclo

alfa1 = (nao * xa(11) + npo * xp(11)) / (nao * xa(8) + npo * xp(8));

$$\text{beta1} = (\text{nao} * \text{xa}(10) + \text{npo} * \text{xp}(10)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{gama1} = (\text{nao} * \text{xa}(9) + \text{npo} * \text{xp}(9)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{delta1} = (\text{nao} * \text{xa}(12) + \text{npo} * \text{xp}(12)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{abgd1} = [\text{alfa1}, \text{beta1}, \text{gama1}, \text{delta1}];$$

% Determinação da composição química resultante da mistura do combustível injetado no coletor de admissão com os produtos da combustão incompleta do primeiro ciclo

% Não confundir n na linha abaixo com número de mols, n significa número de átomos de C na fórmula do combustível

$$\text{n1} = (\text{nfo} * \text{n} + \text{npo} * \text{xp}(6)) / (\text{nfo} + \text{npo} * \text{xp}(6)); \quad \% \text{ C}$$

$$\text{m1} = (\text{nfo} * \text{m} + \text{npo} * (\text{xp}(1) + 2 * \text{xp}(4) + \text{xp}(5))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(1) + \text{xp}(4) + \text{xp}(5))); \quad \% \text{ H}$$

$$\text{l1} = (\text{nfo} * \text{l} + \text{npo} * (\text{xp}(2) + \text{xp}(5) + \text{xp}(6) + \text{xp}(7))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(2) + \text{xp}(5) + \text{xp}(6) + \text{xp}(7))); \quad \% \text{ O}$$

$$\text{k1} = (\text{nfo} * \text{k} + \text{npo} * (\text{xp}(3) + \text{xp}(7))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(3) + \text{xp}(7))); \quad \% \text{ N}$$

% Determinação da relação (ar + gases residuais do primeiro ciclo)/combustível estequiométrica no segundo ciclo na_nfl

$$\text{na_nfl} = (\text{n1} + \text{m1}/4 - \text{l1}/2) * (1 + \text{alfa1} + \text{beta1} + \text{gama1} + \text{delta1});$$

% Determinação do número de mols na1 de ar e gases residuais comburentes no segundo ciclo

$$\text{na1} = \text{nao} + \text{npo} * \text{sum}(\text{xp}(8:12));$$

% Determinação do número de mols nfl de combustível e gases residuais combustíveis no segundo ciclo

$$\text{nfl} = \text{nfo} + \text{npo} * \text{sum}(\text{xp}(1:7));$$

% Determinação da razão de equivalência fi1 no segundo ciclo

$$\text{fi1} = \text{na_nfl} * \text{nfl} / \text{na1};$$

$$\text{mole_contents} = [\text{nao}, \text{nfo}, \text{npo}];$$

% Determinação da temperatura inicial Tbo dos gases de combustão no segundo ciclo

```
Tbo = Tb_o2(n1, m1, l1, k1, f1, po, Tuo, ura, abgd1, molar_fractions, mole_contents); %
```

% Determinação das frações molares iniciais dos gases de combustão no segundo ciclo

```
x8o = 1e-9; % arbitrado por levar à convergência da função proptermeq
```

```
[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n1, m1, l1, k1, f1, po, Tbo, x_H2O, x8o);
```

```
yo = [po Tbo Tuo x(8) x(13)]; % vetor de condições iniciais do modelo de combustão
```

% Definição dos parâmetros do modelo de combustão no segundo ciclo

```
fuel1 = [n1 m1 l1 k1 f1];
```

```
A1 = [omega, B, L, S, rc, a_w, m_w, teta_spk, teta_f, po, Tuo, Vo, Tw, nao, nfo, npo, fuel1, xa, xp, abgd1]; % matriz definida como A1 para não confundir com a área das paredes do cilindro
```

% Integração do modelo de combustão do segundo ciclo

```
[t, y] = ode45(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1);
```

```
% [t, y] = ode15s(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1)
```

```
% Nota: '[]' entre yo e A1 é necessário como 'placeholder' para options
```

% Definição dos vetores p, Tb, Tu; resultados da integração do modelo de combustão do segundo ciclo

```
p = y(:,1);  
Tb = y(:,2);  
Tu = y(:,3);  
xb8 = y(:,4);  
xb13 = y(:,5);
```

% Definição dos vetores na, nf, np; determinados a partir da função de Wiebe e dos tempos de integração do modelo de combustão do segundo ciclo

```
last = length(t);
```

```
clear na nf np % necessário para permitir nova dimensão aos vetores na, nf, np
```

```
for i=1:last
```

```
    teta = omega * t(i);
```

```
    [fb, dfb_dteta] = Wiebe(a_w, m_w, teta, teta_spk, teta_f);
```

```

na(i) = nao * (1-fb);
nf(i) = nfo * (1-fb);
np(i) = npo * (1-fb);
end % for

```

% na, nf, np são determinados como vetores linha, devem ser transpôs.tos para se tornarem vetores coluna.

% Definição do vetor de resultados de integração do modelo de combustão do segundo ciclo

```

ycomb2 = [na' nf' np' p Tb Tu];
tcomb2 = t;

```

% Concatenação dos vetores de resultados

```

y = [yeac1; ycomb1; yeac2; ycomb2];

```

```

t = [teac1; tcomb1; teac2; tcomb2];

```

```

na = y(:,1);
nf = y(:,2);
np = y(:,3);
p = y(:,4);
Tb = y(:,5);
Tu = y(:,6);

```

% Determinação dos vetores de posições angulares

```

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

```

```

teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas, rad

```

% Determinação do vetor de volumes

```

a = S/2;

```

```

clear V;

```

```

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank)- sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

```

% Exibição dos resultados dos dois ciclos na forma gráfica

```

figure % abre nova janela gráfica

```

```

plot(t, p, t,Tb/100, t,Tu/100, t,na*100) % exhibe os resultados

```

% *** Final do modelo de combustão do segundo ciclo *******

% *** Início do modelo exh_adm_comp do terceiro ciclo *******

% Determinação das condições iniciais do modelo exh_adm_comp no terceiro ciclo

last = length(t); % comprimento do vetor dos resultados da integração do modelo de combustão

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, tmax, B, L, S, rc); % Vo é o volume do cilindro ao final da combustão

npo = 1e5 * p(last) * Vo / R / Tb(last); % número inicial de mols de produtos da combustão na integração do modelo exh_adm_comp do próximo ciclo; p(last) e Tb(last) são a pressão e temperatura no interior do cilindro ao final da combustão.

nao = 0; % não existe ar no interior do cilindro ao final da combustão
nfo = 0; % não existe combustível no interior do cilindro ao final da combustão
To = Tb(last); % a temperatura inicial dos gases no próximo ciclo é igual à temperatura ao final da combustão
po = p(last);

% Determinação das frações molares xp dos gases residuais que estarão no interior do cilindro durante o terceiro ciclo

x8o = 1e-9;

[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n1, m1, l1, k1, f1, po, To, x_H2O, x8o);

xp = x(1:12);

molar_fractions = [xa xp];

% Definição do vetor de condições iniciais para a integração do modelo exh_adm_comp no terceiro ciclo

yo = [nao nfo npo To];

% Definição dos limites de integração do modelo exh_adm_comp no terceiro ciclo

tmin = t(last);
tmax = tmin + (4*pi + teta_spk - evo) / omega;

% Definição dos parâmetros do modelo exh_adm_comp4 no terceiro ciclo

A2 = [engine, fuel, air, exh, molar_fractions, abgd];

% Integração do modelo exh_adm_comp no terceiro ciclo

```

[t, y] = ode45(@exh_adm_comp4, [tmin tmax], yo, [], A2);

clear na nf np          % necessário para permitir nova dimensão aos vetores na, nf, np

na = y(:, 1);
nf = y(:, 2);
np = y(:, 3);
T = y(:, 4);

% Determinação dos vetores de posições angulares correspondentes aos tempos de
integração da rotina ode45

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas,
rad

% Determinação do vetor de volumes

a = S/2;

clear V;

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank) - sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

% Determinação do vetor de pressões

p = 1e-5 * (na + nf + np) * R .* T ./ V;

% Gravação dos resultados

yeac3 = [na nf np p T T];

teac3 = t;

% Concatenação dos vetores de resultados

y = [yeac1; ycomb1; yeac2; ycomb2; yeac3];

t = [teac1; tcomb1; teac2; tcomb2; teac3];

na = y(:,1);
nf = y(:,2);
np = y(:,3);
p = y(:,4);
Tb = y(:,5);
Tu = y(:,6);

```

% Determinação dos vetores de posições angulares

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas, rad

% Determinação do vetor de volumes

a = S/2;

clear V;

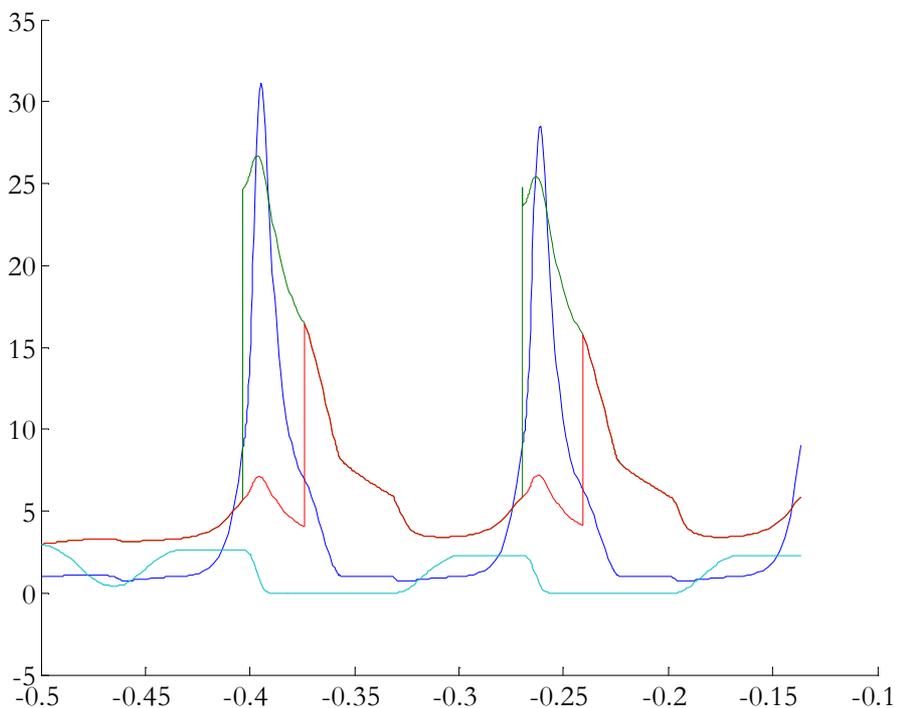
V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank) - sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

% Exibição dos resultados desde o primeiro até a compressão do terceiro ciclo na forma gráfica

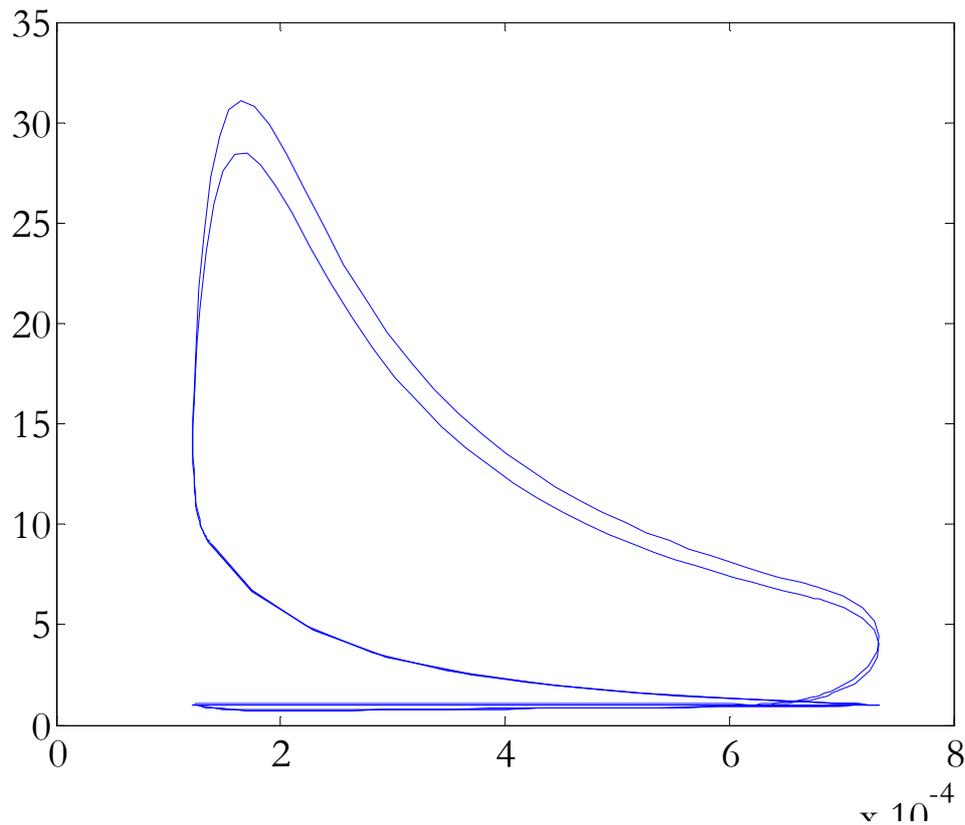
figure % abre nova janela gráfica

plot(t, p, t,Tb/100, t,Tu/100, t,na*100) % exibe os resultados

% *** Final do modelo exh_adm_comp do terceiro ciclo *******



% Fig. E.4: pressão (azul), número de mols de ar (azul claro), temperatura da mistura fresca Tu (vermelho), temperatura dos gases de combustão Tb (verde), simulação do primeiro e segundo ciclos completos e da compressão do terceiro ciclo.



% Fig. E.5: Diagrama p V do primeiro e do segundo ciclo completos.

% *** Início do modelo de combustão do terceiro ciclo *******

% Determinação das condições iniciais de integração do modelo de combustão do terceiro ciclo

last = length(t); % comprimento do vetor de resultados de integração do modelo
exh_adm_comp

po = p(last); % pressão inicial do modelo two_zone_model
Tuo = Tu(last); % temperatura inicial da mistura não queimada
to = t(last); % tempo inicial de integração

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, to, B, L, S, rc); % volume inicial do cilindro

% teste da função two_zone_model v3

% Este script executa a integração do modelo two_zone_model_v7 entre to e tmax e determina as condições iniciais e limites de integração do modelo exh_adm_comp4 do terceiro ciclo

```

% Definição das constantes do modelo de combustão

% Definição dos limites de integração do modelo de combustão do terceiro ciclo

tmin = to + 1e-4;    % deslocamento para permitir a convergência

tmax = tmin + (evo-teta_spk)/omega;

% Determinação do volume inicial do cilindro

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, tmin, B, L, S, rc);

% Definição da abertura das válvulas

h_int = 0;          % válvula de admissão fechada durante a combustão
h_exh = 0;          % válvula de escapamento fechada durante a
combustão

% Determinação do número de mols no interior do cilindro no início da combustão
do terceiro ciclo

% De acordo com a equação de estado dos gases ideais em base molar, n_mols = p V / (R
T)

% O número de mols foi definido como n_mols para evitar confusão com n, número de
átomos de C na fórmula do combustível

n_mols = na(last) + nf(last) + np(last);

nao = na(last);
nfo = nf(last);
npo = np(last);

% Definição dos parâmetros do modelo de combustão do terceiro ciclo

% engine = [omega, B, L, S, rc, Tw, D_int, D_exh];
% flame = [a_w, m_w, teta_spk, teta_f];
% molar_fractions = [xa, xp];
% mole_contents = [nao, nfo, npo];
% fuel = [n, m, l, k, fi];

% Definição do vetor de condições iniciais do modelo de combustão do terceiro
ciclo

% Determinação dos valores da alfa2, beta2, gama2, delta2 da mistura de ar e gases
residuais do segundo ciclo

```

$$\text{alfa2} = (\text{nao} * \text{xa}(11) + \text{npo} * \text{xp}(11)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{beta2} = (\text{nao} * \text{xa}(10) + \text{npo} * \text{xp}(10)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{gama2} = (\text{nao} * \text{xa}(9) + \text{npo} * \text{xp}(9)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{delta2} = (\text{nao} * \text{xa}(12) + \text{npo} * \text{xp}(12)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{abgd2} = [\text{alfa2}, \text{beta2}, \text{gama2}, \text{delta2}];$$

% Determinação da composição química resultante da mistura do combustível injetado no coletor de admissão com os produtos da combustão incompleta do segundo ciclo

% Não confundir n na linha abaixo com número de mols, n significa número de átomos de C na fórmula do combustível

$$\text{n2} = (\text{nfo} * \text{n} + \text{npo} * \text{xp}(6)) / (\text{nfo} + \text{npo} * \text{xp}(6)); \quad \% \text{ C}$$

$$\text{m2} = (\text{nfo} * \text{m} + \text{npo} * (\text{xp}(1) + 2 * \text{xp}(4) + \text{xp}(5))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(1) + \text{xp}(4) + \text{xp}(5))); \quad \% \text{ H}$$

$$\text{l2} = (\text{nfo} * \text{l} + \text{npo} * (\text{xp}(2) + \text{xp}(5) + \text{xp}(6) + \text{xp}(7))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(2) + \text{xp}(5) + \text{xp}(6) + \text{xp}(7))); \quad \% \text{ O}$$

$$\text{k2} = (\text{nfo} * \text{k} + \text{npo} * (\text{xp}(3) + \text{xp}(7))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(3) + \text{xp}(7))); \quad \% \text{ N}$$

% Determinação da relação (ar + gases residuais do segundo ciclo)/combustível estequiométrica no terceiro ciclo na_nf2

$$\text{na_nf2} = (\text{n2} + \text{m2}/4 - \text{l2}/2) * (1 + \text{alfa2} + \text{beta2} + \text{gama2} + \text{delta2});$$

% Determinação do número de mols na2 de ar e gases residuais comburentes no terceiro ciclo

$$\text{na2} = \text{nao} + \text{npo} * \text{sum}(\text{xp}(8:12));$$

% Determinação do número de mols nf2 de combustível e gases residuais combustíveis no terceiro ciclo

$$\text{nf2} = \text{nfo} + \text{npo} * \text{sum}(\text{xp}(1:7));$$

% Determinação da razão de equivalência fi2 no terceiro ciclo

$$\text{fi2} = \text{na_nf2} * \text{nf2} / \text{na2};$$

$$\text{mole_contents} = [\text{nao}, \text{nfo}, \text{npo}];$$

% Determinação da temperatura inicial Tbo dos gases de combustão no terceiro ciclo

```
Tbo = Tb_o2(n2, m2, l2, k1, fi2, po, Tuo, ura, abgd2, molar_fractions, mole_contents); %
```

% Determinação das frações molares iniciais dos gases de combustão no terceiro ciclo

```
x8o = 1e-9; % arbitrado por levar à convergência da função proptermeq
```

```
[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n2, m2, l2, k1, fi2, po, Tbo, x_H2O, x8o);
```

```
yo = [po Tbo Tuo x(8) x(13)]; % vetor de condições iniciais do modelo de combustão
```

% Definição dos parâmetros do modelo de combustão no terceiro ciclo

```
fuel2 = [n2 m2 l2 k1 fi2];
```

```
A1 = [omega, B, L, S, rc, a_w, m_w, teta_spk, teta_f, po, Tuo, Vo, Tw, nao, nfo, npo, fuel2, xa, xp, abgd2]; % matriz definida como A1 para não confundir com a área das paredes do cilindro
```

% Integração do modelo de combustão do terceiro ciclo

```
[t, y] = ode45(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1);
```

```
% [t, y] = ode15s(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1)
```

```
% Nota: '[]' entre yo e A1 é necessário como 'placeholder' para options
```

% Definição dos vetores p, Tb, Tu; resultados da integração do modelo de combustão do terceiro ciclo

```
p = y(:,1);  
Tb = y(:,2);  
Tu = y(:,3);  
xb8 = y(:,4);  
xb13 = y(:,5);
```

% Definição dos vetores na, nf, np; determinados a partir da função de Wiebe e dos tempos de integração do modelo de combustão do terceiro ciclo

```
last = length(t);
```

```
clear na nf np % necessário para permitir nova dimensão aos vetores na, nf, np
```

```
for i=1:last
```

```
    teta = omega * t(i);
```

```
    [fb, dfb_dteta] = Wiebe(a_w, m_w, teta, teta_spk, teta_f);
```

```

    na(i) = nao * (1-fb);
    nf(i) = nfo * (1-fb);
    np(i) = npo * (1-fb);
end % for

```

% na, nf, np são determinados como vetores linha, devem ser transpôs.tos para se tornarem vetores coluna.

% Definição do vetor de resultados de integração do modelo de combustão do terceiro ciclo

```

ycomb3 = [na' nf' np' p Tb Tu];
tcomb3 = t;

```

% Concatenação dos vetores de resultados

```

y = [yeac1; ycomb1; yeac2; ycomb2; yeac3; ycomb3];

```

```

t = [teac1; tcomb1; teac2; tcomb2; teac3; tcomb3];

```

```

na = y(:,1);
nf = y(:,2);
np = y(:,3);
p = y(:,4);
Tb = y(:,5);
Tu = y(:,6);

```

% Determinação dos vetores de posições angulares

```

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

```

```

teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas, rad

```

% Determinação do vetor de volumes

```

a = S/2;

```

```

clear V;

```

```

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank)- sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

```

% Exibição dos resultados dos dois ciclos na forma gráfica

```

figure % abre nova janela gráfica

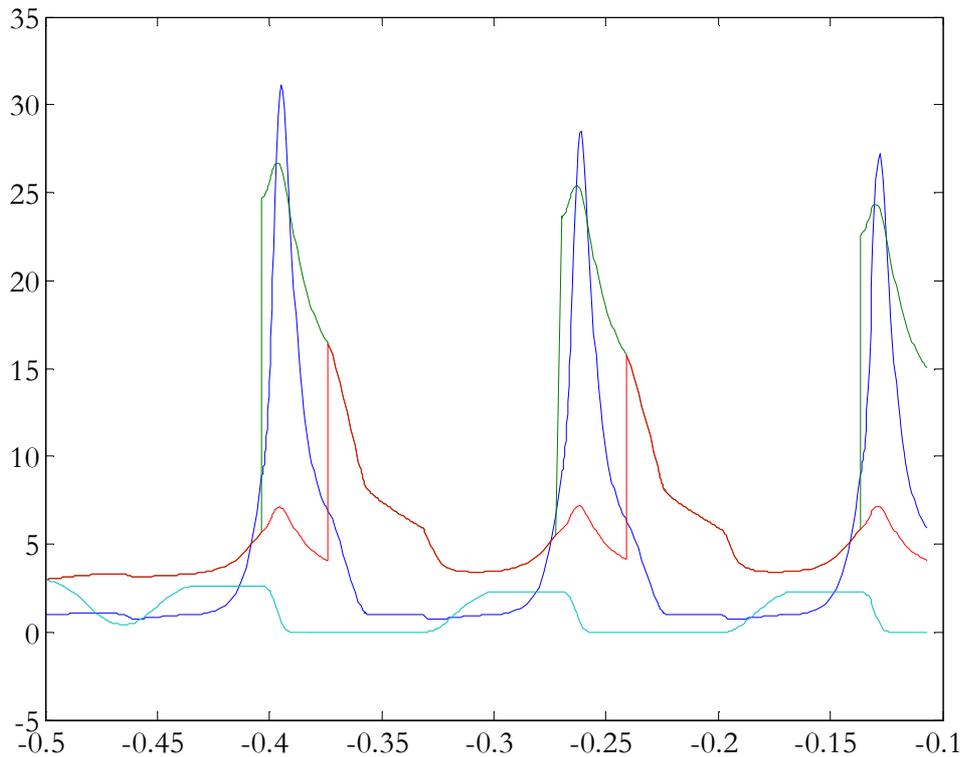
```

```

plot(t, p, t,Tb/100, t,Tu/100, t,na*100) % exhibe os resultados

```

% *** Final do modelo de combustão do terceiro ciclo *******



% Fig. E.6: pressão (azul), número de mols de ar (azul claro), temperatura da mistura fresca T_u (vermelho), temperatura dos gases de combustão T_b (verde), simulação do primeiro, segundo e terceiro ciclos completos.

% *** Início do modelo exh_adm_comp do quarto ciclo *******

% Determinação das condições iniciais do modelo exh_adm_comp no quarto ciclo

last = length(t); % comprimento do vetor dos resultados da integração do modelo de combustão

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, tmax, B, L, S, rc); % Vo é o volume do cilindro ao final da combustão

npo = 1e5 * p(last) * Vo / R / Tb(last); % número inicial de mols de produtos da combustão na integração do modelo exh_adm_comp do próximo ciclo; p(last) e Tb(last) são a pressão e temperatura no interior do cilindro ao final da combustão.

nao = 0; % não existe ar no interior do cilindro ao final da combustão

nfo = 0; % não existe combustível no interior do cilindro ao final da combustão

To = Tb(last); % a temperatura inicial dos gases no próximo ciclo é igual à temperatura ao final da combustão

po = p(last);

% Determinação das frações molares xp dos gases residuais que estarão no interior do cilindro durante o quarto ciclo

x8o = 1e-9;

[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n2, m2, l2, k2, fi2, po, To, x_H2O, x8o);

xp = x(1:12);

molar_fractions = [xa xp];

% Definição do vetor de condições iniciais para a integração do modelo exh_adm_comp no quarto ciclo

yo = [nao nfo npo To];

% Definição dos limites de integração do modelo exh_adm_comp no quarto ciclo

tmin = t(last);

tmax = tmin + (4*pi + teta_spk - evo) / omega;

% Definição dos parâmetros do modelo exh_adm_comp4 no quarto ciclo

A2 = [engine, fuel, air, exh, molar_fractions, abgd];

% Integração do modelo exh_adm_comp no quarto ciclo

[t, y] = ode45(@exh_adm_comp4, [tmin tmax], yo, [], A2);

clear na nf np % necessário para permitir nova dimensão aos vetores na, nf, np

na = y(:, 1);

nf = y(:, 2);

np = y(:, 3);

T = y(:, 4);

% Determinação dos vetores de posições angulares correspondentes aos tempos de integração da rotina ode45

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

teta_cam = teta_crank ./ 2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas, rad

% Determinação do vetor de volumes

a = S/2;

```

clear V;

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank)- sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

% Determinação do vetor de pressões

p = 1e-5 * (na + nf + np) * R .* T ./ V;

% Gravação dos resultados

yeac4 = [na nf np p T T];

teac4 = t;

% Concatenação dos vetores de resultados

y = [yeac1; ycomb1; yeac2; ycomb2; yeac3; ycomb3; yeac4];

t = [teac1; tcomb1; teac2; tcomb2; teac3; tcomb3; teac4];

na = y(:,1);
nf = y(:,2);
np = y(:,3);
p = y(:,4);
Tb = y(:,5);
Tu = y(:,6);

% Determinação dos vetores de posições angulares

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas,
rad

% Determinação do vetor de volumes

a = S/2;

clear V;

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank)- sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

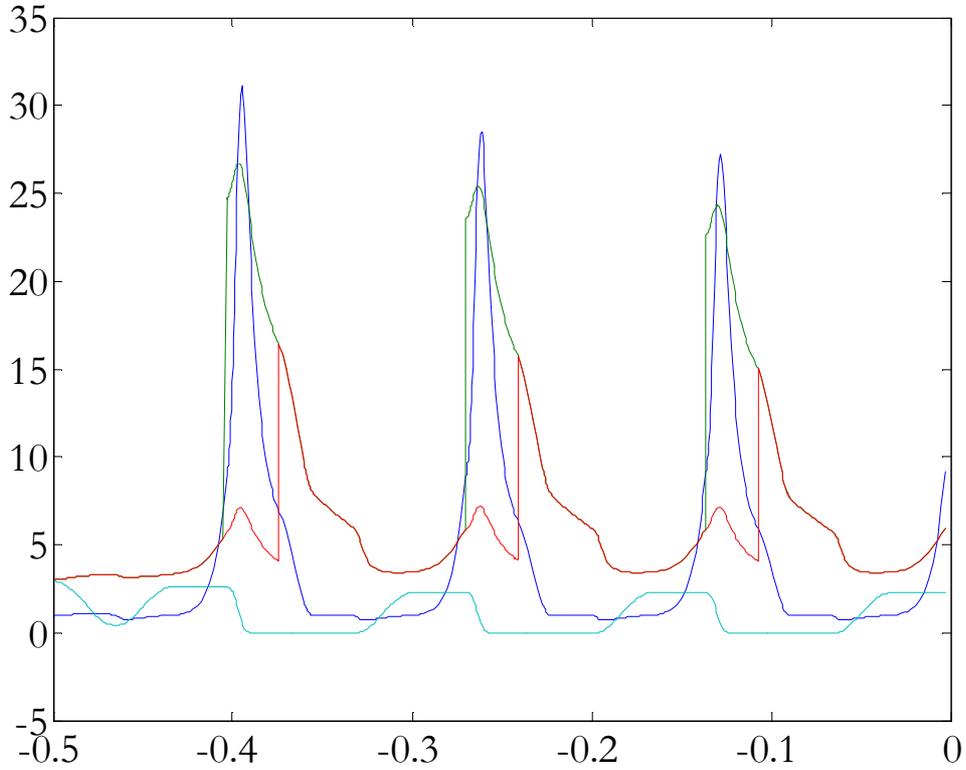
% Exibição dos resultados desde o primeiro até a compressão do quarto ciclo na
forma gráfica

figure % abre nova janela gráfica

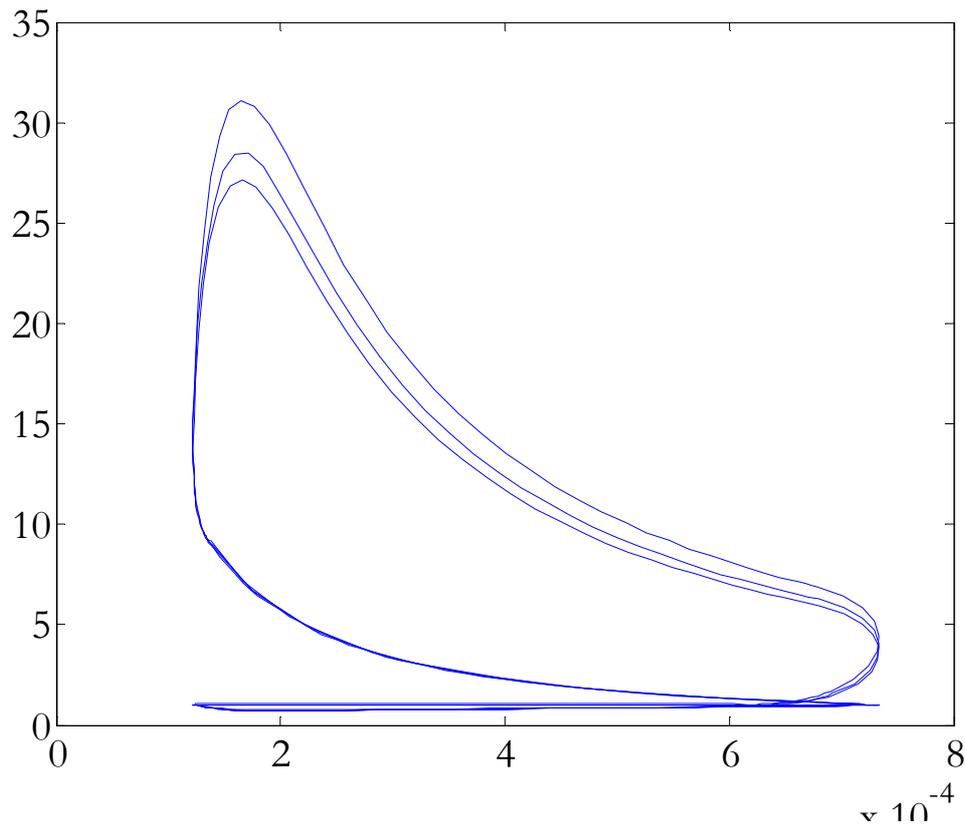
```

```
plot(t, p, t,Tb/100, t,Tu/100, t,na*100) % exibe os resultados
```

```
% ***** Final do modelo exh_adm_comp do quarto ciclo *****
```



% Fig. E.7: pressão (azul), número de mols de ar (azul claro), T_u (vermelho), temperatura dos gases de combustão T_b (verde), simulação do primeiro, segundo e terceiro ciclos completos e da compressão do quarto ciclo.



% Fig. E.8: Diagrama p V do primeiro, segundo e terceiro ciclos completos.

% *** Início do modelo de combustão do quarto ciclo *******

% Determinação das condições iniciais de integração do modelo de combustão do quarto ciclo

last = length(t); % comprimento do vetor de resultados de integração do modelo
exh_adm_comp

po = p(last); % pressão inicial do modelo two_zone_model
Tuo = Tu(last); % temperatura inicial da mistura não queimada
to = t(last); % tempo inicial de integração

[Ao, Vo, dVo_dteta] = geocil(omega, to, B, L, S, rc); % volume inicial do cilindro

% teste da função two_zone_model v3

% Este script executa a integração do modelo two_zone_model_v7 entre to e tmax e determina as condições iniciais e limites de integração do modelo exh_adm_comp4 do quarto ciclo

% Definição das constantes do modelo de combustão

$$\text{beta3} = (\text{nao} * \text{xa}(10) + \text{npo} * \text{xp}(10)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{gama3} = (\text{nao} * \text{xa}(9) + \text{npo} * \text{xp}(9)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{delta3} = (\text{nao} * \text{xa}(12) + \text{npo} * \text{xp}(12)) / (\text{nao} * \text{xa}(8) + \text{npo} * \text{xp}(8));$$

$$\text{abgd3} = [\text{alfa3}, \text{beta3}, \text{gama3}, \text{delta3}];$$

% Determinação da composição química resultante da mistura do combustível injetado no coletor de admissão com os produtos da combustão incompleta do terceiro ciclo

% Não confundir n na linha abaixo com número de mols, n significa número de átomos de C na fórmula do combustível

$$\text{n3} = (\text{nfo} * \text{n} + \text{npo} * \text{xp}(6)) / (\text{nfo} + \text{npo} * \text{xp}(6)); \quad \% \text{ C}$$

$$\text{m3} = (\text{nfo} * \text{m} + \text{npo} * (\text{xp}(1) + 2 * \text{xp}(4) + \text{xp}(5))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(1) + \text{xp}(4) + \text{xp}(5))); \quad \% \text{ H}$$

$$\text{l3} = (\text{nfo} * \text{l} + \text{npo} * (\text{xp}(2) + \text{xp}(5) + \text{xp}(6) + \text{xp}(7))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(2) + \text{xp}(5) + \text{xp}(6) + \text{xp}(7))); \quad \% \text{ O}$$

$$\text{k3} = (\text{nfo} * \text{k} + \text{npo} * (\text{xp}(3) + \text{xp}(7))) / (\text{nfo} + \text{npo} * (\text{xp}(3) + \text{xp}(7))); \quad \% \text{ N}$$

% Determinação da relação (ar + gases residuais do terceiro ciclo)/combustível estequiométrica no quarto ciclo na_nf3

$$\text{na_nf3} = (\text{n3} + \text{m3}/4 - \text{l3}/2) * (1 + \text{alfa3} + \text{beta3} + \text{gama3} + \text{delta3});$$

% Determinação do número de mols na3 de ar e gases residuais comburentes no quarto ciclo

$$\text{na3} = \text{nao} + \text{npo} * \text{sum}(\text{xp}(8:12));$$

% Determinação do número de mols nf3 de combustível e gases residuais combustíveis no quarto ciclo

$$\text{nf3} = \text{nfo} + \text{npo} * \text{sum}(\text{xp}(1:7));$$

% Determinação da razão de equivalência fi3 no quarto ciclo

$$\text{fi3} = \text{na_nf3} * \text{nf3} / \text{na3};$$

$$\text{mole_contents} = [\text{nao}, \text{nfo}, \text{npo}];$$

% Determinação da temperatura inicial Tbo dos gases de combustão no quarto ciclo

```
Tbo = Tb_o2(n3, m3, l3, k3, fi3, po, Tuo, ura, abgd3, molar_fractions, mole_contents); %
```

```
% Determinação das frações molares iniciais dos gases de combustão no quarto ciclo
```

```
x8o = 1e-9; % arbitrado por levar à convergência da função proptermeq
```

```
[x, h, cp, dx_dt, dx_dp] = proptermeq(n3, m3, l3, k3, fi3, po, Tbo, x_H2O, x8o);
```

```
yo = [po Tbo Tuo x(8) x(13)]; % vetor de condições iniciais do modelo de combustão
```

```
% Definição dos parâmetros do modelo de combustão no quarto ciclo
```

```
fuel3 = [n3 m3 l3 k3 fi3];
```

```
A1 = [omega, B, L, S, rc, a_w, m_w, teta_spk, teta_f, po, Tuo, Vo, Tw, nao, nfo, npo, fuel3, xa, xp, abgd3]; % matriz definida como A1 para não confundir com a área das paredes do cilindro
```

```
% Integração do modelo de combustão do quarto ciclo
```

```
[t, y] = ode45(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1);
```

```
% [t, y] = ode15s(@two_zone_model_v7, [tmin tmax], yo, [], A1)
```

```
% Nota: '[]' entre yo e A1 é necessário como 'placeholder' para options
```

```
% Definição dos vetores p, Tb, Tu; resultados da integração do modelo de combustão do quarto ciclo
```

```
p = y(:,1);
```

```
Tb = y(:,2);
```

```
Tu = y(:,3);
```

```
xb8 = y(:,4);
```

```
xb13 = y(:,5);
```

```
% Definição dos vetores na, nf, np; determinados a partir da função de Wiebe e dos tempos de integração do modelo de combustão do quarto ciclo
```

```
last = length(t);
```

```
clear na nf np % necessário para permitir nova dimensão aos vetores na, nf, np
```

```
for i=1:last
```

```
    teta = omega * t(i);
```

```
    [fb, dfb_dteta] = Wiebe(a_w, m_w, teta, teta_spk, teta_f);
```

```
    na(i) = nao * (1-fb);
```

```
    nf(i) = nfo * (1-fb);
```

```

    np(i) = npo * (1-fb);
end % for

```

% na, nf, np são determinados como vetores linha, devem ser transpôs.tos para se tornarem vetores coluna.

% Definição do vetor de resultados de integração do modelo de combustão do quarto ciclo

```

ycomb4 = [na' nf' np' p' Tb' Tu];
tcomb4 = t;

```

% Concatenação dos vetores de resultados

```

y = [yeac1; ycomb1; yeac2; ycomb2; yeac3; ycomb3; yeac4; ycomb4];

```

```

t = [teac1; tcomb1; teac2; tcomb2; teac3; tcomb3; teac4; tcomb4];

```

```

na = y(:,1);
nf = y(:,2);
np = y(:,3);
p = y(:,4);
Tb = y(:,5);
Tu = y(:,6);

```

% Determinação dos vetores de posições angulares

```

teta_crank = omega .* t; % vetor de posições angulares do eixo do virabrequim, rad

```

```

teta_cam = teta_crank ./2; % vetor de posições angulares do eixo de comando de válvulas, rad

```

% Determinação do vetor de frações mássicas queimadas

```

for i=1:length(t)
    teta = teta_crank(i);
    [fb, dfb_dteta] = Wiebe(a_w, m_w, teta, teta_spk, teta_f);
    mfb(i) = fb;
end % for

```

```

mfb = mfb'; % transforma o vetor mfb em coluna para torná-lo compatível com os demais

```

% Determinação do vetor de volumes

```

a = S/2;

```

```

clear V;

```

```

V = Vc * (1 + (rc-1)/2 * (1 + L/a - cos(teta_crank) - sqrt((L/a)^2 - sin(teta_crank).^2)));

```

% Exportação dos resultados para planilha em formato Lotus .wk1 compatível com Excel

```
z = [t, y, mfb, V];          % justapõe os vetores t, y, mfb, V, lado a lado
wk1write('output_data',z);  % grava a matriz z com os dados de saída em uma planilha
                             % chamada output_data.wk1
```

% Exibição dos resultados dos dois ciclos na forma gráfica

```
figure % abre nova janela gráfica
```

```
plot(t, p, t,Tb/100, t,Tu/100, t,na*100, t,mfb*10) % exibe os resultados
```

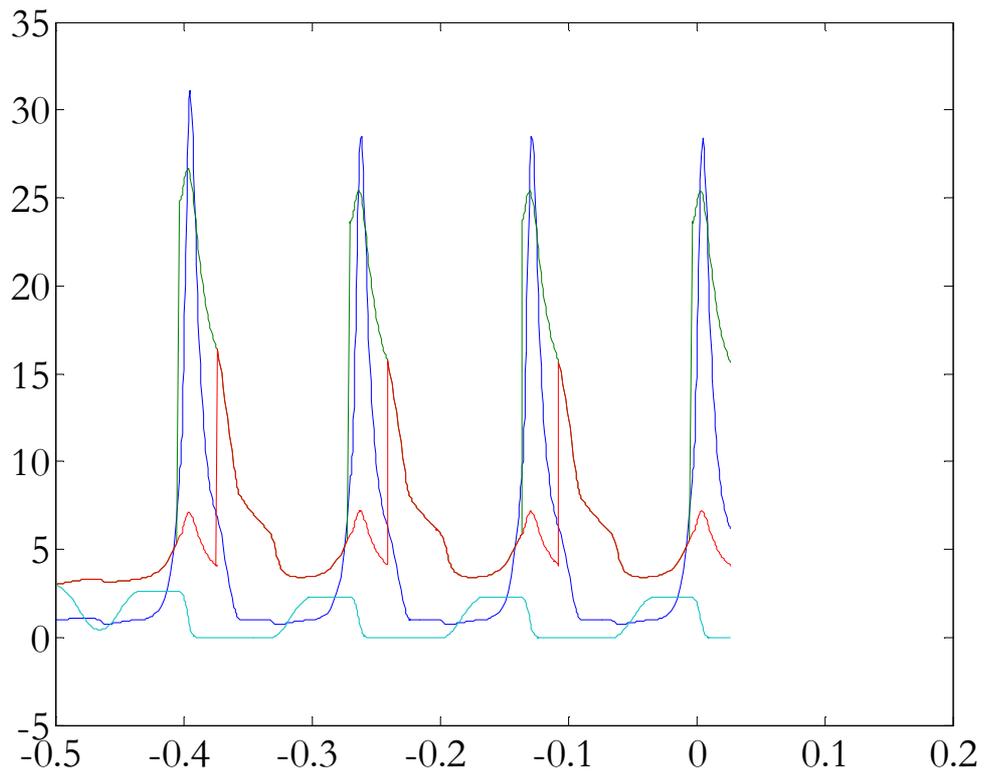
```
figure % abre nova janela gráfica
```

```
teta_gr = teta_crank * 180/pi;
```

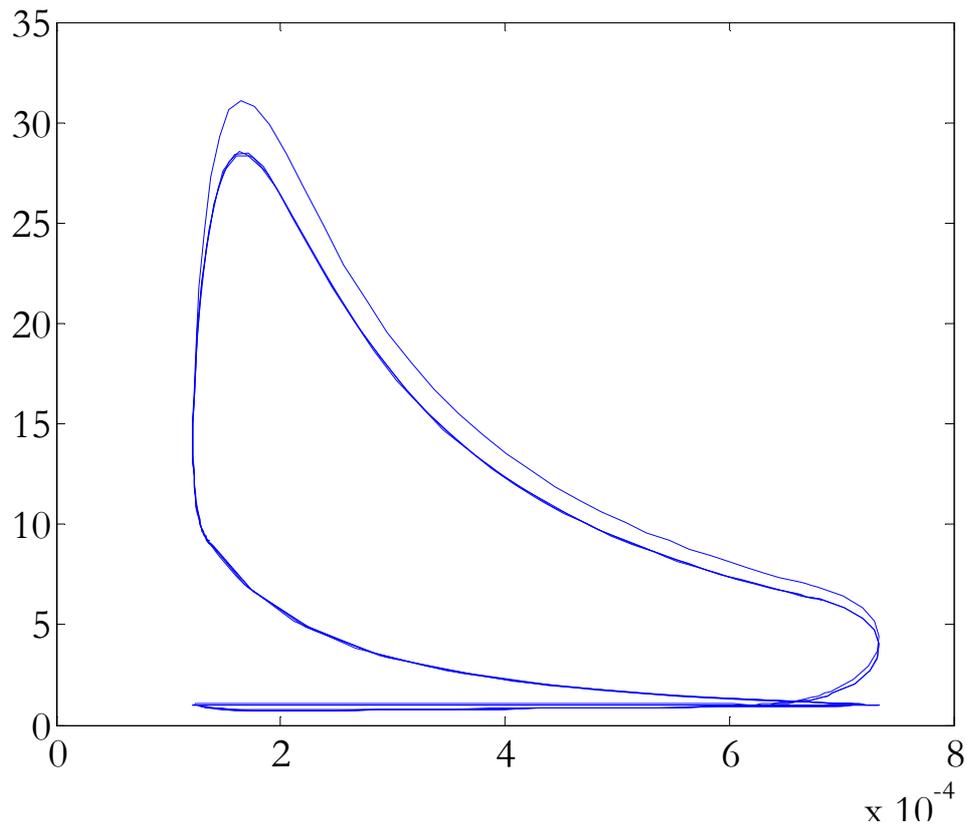
```
plot(teta_gr, p, teta_gr,Tb/100, teta_gr,Tu/100, teta_gr,mfb*10) % exibe os resultados
```

% *** Final do modelo de combustão do quarto ciclo *******

% Após a correção, mantendo fuel e abgd constantes em A2



% Fig. E.9: pressão (azul), número de mols de ar (azul claro), temperatura da mistura fresca T_u (vermelho), temperatura dos gases de combustão T_b (verde), simulação do primeiro, segundo, terceiro e quarto ciclos completos.



% Fig. E.10: Diagrama p V ao longo dos quatro primeiros ciclos.

% Já a partir do segundo ciclo ocorre a estabilização do diagrama p V

% fuel = 8 18 0 0 1

% fuel1 = 7.9921 17.9908 0.0016 0.0003 1.0011

% fuel2 = 7.9855 17.9862 0.0022 0.0003 1.0015

% fuel3 = 7.9806 17.9819 0.0028 0.0000 1.0019

% abgd = 3.7279 0.0018 0 0.0446

% abgd1 = 4.1039 0.0665 0.0726 0.0491

% abgd2 = 4.1091 0.0674 0.0737 0.0492

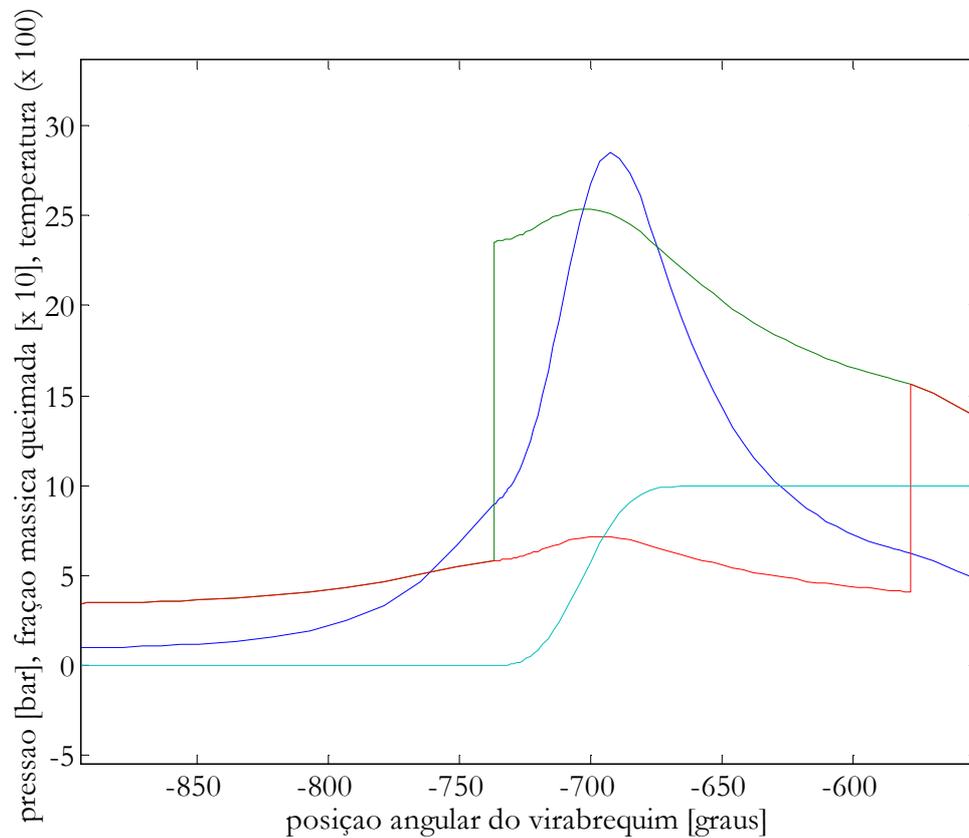
% abgd3 = 4.1129 0.0680 0.0744 0.0492

% max(p1) = 31.1106

$$\% \max(p_2) = 28.4739$$

$$\% \max(p_3) = 28.5278$$

$$\% \max(p_4) = 28.3653$$



% Fig. E.11: Gráfico das temperaturas dos gases de combustão T_b (verde), mistura fresca T_u (vermelho), pressão p no interior do cilindro (azul escuro) e fração de massa queimada f_b (azul claro) em função da posição angular do virabrequim, obtidas por simulação do ciclo completo do motor CFR.

% A figura E.11 é semelhante à Fig. 10 (Heywood, 1989).