

**UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO PARANÁ
CURSO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

RODOLPHO KADES DE OLIVEIRA E SILVA

**MODELO AR-COMBUSTÍVEL DE TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE
CALOR DE MOTORES OTTO**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

GUARAPUAVA

2017

RODOLPHO KADES DE OLIVEIRA E SILVA

**MODELO AR-COMBUSTÍVEL DE TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE
CALOR DE MOTORES OTTO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à disciplina Trabalho de Conclusão de Curso II do Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Tecnológica Federal do Paraná como requisito parcial para aprovação.

Orientador: Prof. Dr. Christian Naaktgeboren

GUARAPUAVA

2017



TERMO DE APROVAÇÃO

MODELO AR-COMBUSTÍVEL DE TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE CALOR DE MOTORES OTTO

por

RODOLPHO KADES DE OLIVEIRA E SILVA

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi apresentado em 29 de junho de 2017 como requisito parcial para a obtenção do título de Bacharel em Engenharia Mecânica. O candidato foi arguido pela Banca Examinadora composta pelos professores abaixo assinados. Após deliberação, a Banca Examinadora considerou o trabalho aprovado.

Dr. Christian Naaktgeboren
Prof. Orientador

Dr.^a Raquel da Cunha Ribeiro da Silva
Membro titular

MSc. Renan Manozzo Galante
Membro titular

”Eu vejo agora que as circunstâncias do nascimento de alguém são irrelevantes. É o que você faz com a dádiva da vida que determina quem você é.”

- Takeshi Shudo.

AGRADECIMENTOS

Ao meu orientador Christian Naaktgeboren, por toda orientação e atenção no pouco tempo que houve de elaboração deste trabalho, e por todo o apoio e conhecimento resultante deste, que com certeza utilizarei pelo resto de minha vida.

Aos meus pais, Robinson Elvis Kades de Oliveira e Silva e Nidelci Bellice Kades de Oliveira e Silva, por todo amor, carinho e suporte financeiro ao longo desta jornada.

À Universidade Tecnológica Federal do Paraná e todo seu corpo docente, direção e administração que me ajudou direta ou indiretamente a finalizar a graduação deste curso superior.

RESUMO

SILVA, R.K.O.. Modelo Ar-Combustível de Tempo Finito de Adição de Calor de Motores Otto. 75 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Guarapuava, 2017.

O estudo de motores de combustão interna de modelos padrão a ar assume que diversas propriedades termodinâmicas do fluido ativo de trabalho são constantes, e que este se trata de ar puro ou algum gás ideal. Evidentemente, os erros de se tomar tais hipóteses para o modelo de trabalho impossibilita os projetos de motores a combustão a ciclo Otto. Algumas propriedades que podem ser reavaliadas para o ciclo Otto de operação destes modelos são o fluido ativo como uma mistura de ar e combustível e uma adição de calor ao sistema não-isocórica, métodos estes desenvolvidos nas referências (BRUNETTI, 2012) e (NAAKTGEBOREN, 2017), respectivamente. Quanto a combustão do modelo e possíveis combustíveis, tem-se relações estequiométricas para se obter os produtos que são gerados, de onde é possível se obter não só as propriedades termodinâmicas no instante desejado, mas também valores de quantidade de calor adicionada ao sistema. As dimensões e outras condições de operação do motor passam a ser relevantes no modelo de adição de calor não-isocórica, visto que a combustão deixa de acontecer instantaneamente, como o modelo de ciclo padrão a ar considerava anteriormente. O presente trabalho elabora um modelo capaz de assumir o fluido ativo como sendo uma mistura de um combustível qualquer com ar, aplicando-se o modelo de tempo finito de adição de calor para solução do problema.

Palavras-chave: Combustível, Motores, Tempo Finito, Combustão Interna, Ciclo Otto

ABSTRACT

SILVA, R.K.O.. Air-Fuel Finite Time Heat Addition Model for Otto Engines. 75 f. Trabalho de Conclusão de Curso – Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Tecnológica Federal do Paraná. Guarapuava, 2017.

The air standard internal combustion engines study assumes that several thermodynamic properties for the work fluid are constant, and also admits this fluid is pure air or ideal gases. Clearly, the error from using this kind of hypotheses for the work model prevents Otto cycle combustion engines projects. Some characteristics that can be rethought for this Otto cycle operation models are fuel and air mixtures as a work fluid and a non isochoric heat addition to the system, knowing that this methods were developed in the references (BRUNETTI, 2012) and (NAAKTGEBOREN, 2017), respectively. For the combustion model and possible fuels, stoichiometric relations can be solved to find the products, from where not only the thermodynamic properties can be calculated for the desired instant, but also the heat addition amount to the system. The engine dimensions and other operating parameters become relevant in the non isochoric heat addition model, since the combustion no longer happens instantly, as the air standard cycle previously consider. The following work aims to develop a new model capable of assume a mixture of air and fuel for the work fluid, while using the finite time heat addition model solution procedure for the problem.

Keywords: Fuel, Engine, Finite Time, Internal Combustion, Otto Cycle

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	– Nomenclaturas referentes às posições do pistão, disponível em (BRUNETTI, 2012).	20
Figura 2	– Nomenclaturas referentes a cinemática do pistão, disponível em (BRUNETTI, 2012).	21
Figura 3	– Superfície $P - \alpha - n$ real, disponível em (BRUNETTI, 2012).	22
Figura 4	– Diagramas $P-v$ resultantes dos modelos de ciclo padrão a ar (linhas) e ciclo Otto de tempo finito de adição de calor (marcas) em escala log-log, para $r = 8$ e $k = 1.3343$, disponível em (NAAKTGEBOREN, 2017).	30
Figura 5	– Diagrama $T - v$ para $r = 12$ e $\theta = -0.5$, disponível em (NAAKTGEBOREN, 2017).	31
Figura 6	– Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, para o tempo de compressão.	38
Figura 7	– Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, após o tempo de adição de calor.	39
Figura 8	– Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, após o tempo de expansão.	40
Figura 9	– Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, após o tempo de retirada de calor.	40
Figura 10	– Curvas de ζ por P obtidas para diferentes valores de r_v a partir da equação 70 obtida por Qui-quadrado.	50
Figura 11	– Curvas de ζ por P obtidas para diferentes valores de r_v a partir da equação 71 obtida por Qui-quadrado.	51
Figura 12	– Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível (em verde) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (marcações em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 0.01^\circ$ e $\varphi = 1.0$	61
Figura 13	– Diagrama P-V para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (marcações em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.0$	62
Figura 14	– Diagrama P-V para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$	64
Figura 15	– Diagrama P-V para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$, em escala logarítmica.	64
Figura 16	– Diagrama $\bar{c}_v - \alpha$ para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$	65
Figura 17	– Diagrama $k - \alpha$ para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$	65
Figura 18	– Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de	

	Calor para diferentes valores de φ , com $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$	66
Figura 19 –	Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de φ , com $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$, em escala logarítmica.	66
Figura 20 –	Diagrama $k-\alpha$ para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de φ , com $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$	67
Figura 21 –	Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de ζ , com $\varphi = 1.0$, $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$	68
Figura 22 –	Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de ζ , com $\varphi = 1.0$, $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$, em escala logarítmica.	68
Figura 23 –	Diagrama $n_F-\alpha$ para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de ζ , com $\varphi = 1.0$, $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$	69

LISTA DE TABELAS

TABELA 1	– Coeficientes estequiométricos para mistura pobre ou estequiométrica.	34
TABELA 2	– Coeficientes estequiométricos para mistura rica.	36
TABELA 3	– Coeficientes estequiométricos para misturas pobres, estequiométricas ou ricas.	37
TABELA 4	– Quantidades de mols para misturas ricas e pobres.	49
TABELA 5	– Sumário do modelo	56

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Grandeza	Unidade
S	Curso do pistão	m
D	Diâmetro do pistão	m
L	Comprimento da biela	m
r_v	Razão de compressão	-
N	Rotação de virabrequim	rpm
θ	Ângulo de ignição	rad
t_c	Tempo de combustão	s
N_a	Quantidade de processos para compressão/expansão	-
N_c	Quantidade de processos para combustão	-
T_0	Temperatura inicial	K
P_0	Pressão inicial	kPa
n_C	Quantidade de átomos de carbono na molécula de combustível	-
n_H	Quantidade de átomos de hidrogênio na molécula de combustível	-
n_O	Quantidade de átomos de oxigênio na molécula de combustível	-
n_N	Quantidade de átomos de nitrogênio na molécula de combustível	-
$\bar{c}_{v,i}$	Calor específico a volume constante da substância i	kJ/mol.K
$\bar{h}_{f,i}^0$	Entalpia de formação da substância i	kJ/mol
φ	Razão de equivalência combustível-ar	-
e_w	Tolerância para o loop k	kJ
e_v	Tolerância para a diferença de volumes	m^3
\bar{R}	Constante universal dos gases	kJ/mol.k
M_i	Massa molar da substância i	kg/mol
V_{du}	Volume descolado unitário	m^3
V_2	Volume mínimo	m^3
r	Raio da manivela	m
r_{LR}	Razão de biela-manivela	m

Símbolo	Grandeza	Unidade
ω	Velocidade angular	rad/s
δ	Duração angular da combustão	rad
α_j	Malha angular	rad
$y(\alpha_j)$	Fração acumulada de reação química	-
$x(\alpha)$	Posição instantânea	m
$V(\alpha)$	Volume instantâneo	m^3
ε	Inverso da quantia estequiométrica de ar	-
n_{ar}	Mols de ar no sistema	mol
n_F	Mols de combustível no sistema	mol
n_i	Quantia de mols da substância i nos produtos	mol
X_i	Fração molar da substância i -	
ζ	Fração de gases residuais	-
$g(r)$	Função da razão volumétrica para cálculo de ζ	-
Q_j	Calor gerado no processo entre estados j e $j + 1$	kJ
$C_{v,j}$	Capacidade térmica da mistura instantânea	kJ/K
$\chi(y_j, \zeta)$	Composição química instantânea	-
W_j^k	Trabalho no processo entre os estados j e $j + 1$	kJ
U_j	Energia interna no estado j	kJ
T_j	Temperatura no estado j	K
P_j	Pressão no estado j	kPa
n_j^k	Coefficiente politrópico no estado j	-
W_{ent}	Trabalho que entra no sistema	kJ
W_{sai}	Trabalho que é executado pelo sistema	kJ
$W_{liquido}$	Trabalho líquido	kJ
Q_{ent}	Calor que entra no sistema	kJ
η_t	Eficiência térmica	-
r_{bw}	Razão de volta de trabalho	-
Subscritos		
i	Substância química {Combustível, CO_2 , H_2O , CO , H_2 , O_2 , N_2 }	-
j	Estado (P_j, T_j) conhecido	-
ent	Quantia que adentra ao sistema	-
sai	Quantia retirada do sistema	-
v	Propriedade a volume constante	-
Superscrito		
k	Número da correção do expoente politrópico (n_j^k)	-

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	OBJETIVOS	16
1.2	JUSTIFICATIVA	16
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	18
2.1	MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA COM IGNIÇÃO POR CENTELHA	18
2.2	MODELAGEM TERMODINÂMICA	22
2.2.1	Hipóteses do Ciclo Padrão a Ar	22
2.2.2	Ciclo Otto Padrão a Ar	23
2.2.3	Tempo Finito de Adição de Calor	25
2.2.4	Modelo de Ciclo Otto Ar-Combustível	31
2.2.5	Discussão	41
2.3	MISTURAS E SUAS PROPRIEDADES	41
3	METODOLOGIA	45
4	MODELO DE CICLO OTTO A AR-COMBUSTÍVEL COM TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE CALOR	46
4.1	PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO	55
4.2	RESUMO DO MODELO	56
4.3	VALIDAÇÃO DO MODELO	60
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	63
6	SUGESTÕES PARA FUTUROS ESTUDOS	70
7	CONCLUSÕES	71
	REFERÊNCIAS	72
	Anexo A – ALGORITMOS PARA RESOLUÇÃO DO MÉTODO DE TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE CALOR	74

1 INTRODUÇÃO

Os motores a combustão são máquinas térmicas simples, isto é, convertem o calor transferido pela combustão em trabalho mecânico, calor este obtido por processos termoquímicos que ocorrem no combustível enquanto queima. Estes motores são comumente classificados em Motores de Combustão Externa (MCE), nos quais o Fluido Ativo (FA) irá transportar a energia liberada por uma combustão externa para a máquina que a converte em trabalho; ou Motores de Combustão Interna (MCI), onde o FA irá queimar para gerar a energia térmica. Os estudos de MCI costumam levar em consideração dois principais modelos de motores com ignição por centelha, o modelo de “ciclos Otto Padrão a Ar” ou o modelo de “ciclos Otto a Ar-Combustível”, sendo ambos constituídos de 4 principais tempos de operação: Admissão, onde o pistão de trabalho se desloca do ponto morto superior (PMS) até o ponto morto inferior (PMI), isto é, o pistão que anteriormente estava o mais próximo possível do cabeçote se move até o mais longe possível deste, ocasionando um decréscimo de pressão no interior do motor, o que leva o FA para dentro do sistema por sucção; Compressão, em que o FA admitido é submetido a uma pressão pelo pistão, diminuindo seu volume até o PMS, onde a centelha para que haja ignição é liberada; a Expansão, devido à combustão do FA, a pressão se eleva e o pistão se move até o PMI; e, por fim, o Escape, para que os gases queimados sejam retirados do sistema pela válvula de escape e o pistão retorne ao PMS (BRUNETTI, 2012).

O primeiro dos modelos é conhecido por ser relativamente simples de se obter soluções analíticas sem necessidade de cálculos complexos ou implementações do modelo em softwares, sendo chamado de Ciclo Otto Padrão a Ar, elaborado com base no ciclo real de um motor a quatro tempos, porém com algumas hipóteses admitidas a fim de que ocorra tal simplificação. Estas hipóteses são: O FA do sistema é ar, e este se comporta como gás ideal; os processos de admissão e escape são desnecessários, permitindo o uso da primeira lei da termodinâmica; os processos de compressão e expansão são isentrópicos; os processos de combustão e escape são substituídos por admissão e por retirada de calor em processos isocóricos, utilizando-se fontes quente e fria, respectivamente. Estes processos são ainda reversíveis, por hipótese. O uso de tal modelo acarreta em erros para projetos de MCI devido ao FA não sofrer alteração alguma em

sua composição, visto que o processo de combustão passa a ser a adição de calor instantânea ao sistema, e também pelo fato das transferências de calor serem instantâneas, o que torna as condições de operação, como a rotação do motor, irrelevantes aos cálculos no modelo de modo geral (BRUNETTI, 2012).

Já no modelo de Ciclo Otto a Ar-Combustível, o FA é admitido como sendo uma mistura de ar, combustível e gases residuais da queima do ciclo anterior, o que permite uma melhor análise da quantidade de energia disponível para a conversão em trabalho, assim como uma regulagem de quanto combustível deve ser admitido ao motor. Este modelo parte da hipótese de equilíbrio químico local, para se calcular a quantidade de produtos dissociados após a combustão, via um sistema de equações não lineares. Todavia, o problema quanto a geometria e condições de operação do MCI ainda não é solucionado por este modelo, visto que apesar da combustão ser considerada, ainda se trata de um processo instantâneo, além das equações estequiométricas serem complexas e não abrangerem todos os combustíveis disponíveis (BRUNETTI, 2012).

Esta irreversibilidade que o processo de combustão apresenta é foco de estudo em diversos modelos de MCI a ar-combustível em pesquisas na área de engenharia, porém este processo é sempre limitado a certa quantidade de combustíveis tabelados, ou, como apresentado em (BRUNETTI, 2012), normalizados pela quantidade de carbono presente, o que impossibilita o uso de combustíveis sem base de carbono no modelo. Outros modelos apresentam ainda um estudo dos processos termodinâmicos irreversíveis em conjunto com a chamada termodinâmica do tempo finito, visando quantificar o desempenho destes processos em determinado tempo finito, permitindo cálculos de eficiências mais realistas. Estudos mais recentes mostram um modelo de tempo finito de adição de calor, pospondo a instantaneidade que antes era admitida neste processo de adição de calor, ou de combustão (EBRAHIMI, 2014) (HERNANDEZ et al., 1995) (KRUSIN et al., 1978) (LILEY, 1999) (MOZURKEWICH; BERRY, 1982) (NAAKTGEBOREN, 2017) (OZCAN, 2011) (RUBIN, 1979a) (RUBIN, 1979b) (SALAMON; NITZAN, 1981).

O modelo de Tempo Finito de Adição de Calor apresenta uma melhora na precisão do modelo a ciclo Otto ao tratar o processo de adição de calor como não-isocórico, visto que este processo modela a combustão do FA, que, por sua vez, não ocorre a volume constante, incluindo também os parâmetros dos mecanismos de biela-manivela e virabrequim que constituem o MCI, garantindo melhor análise do tempo de ignição e da potência do motor. Todavia, este modelo proposto em (NAAKTGEBOREN, 2017) admite a hipótese de reversibilidade interna presente no modelo de ciclo Otto padrão a ar, evitando as relações estequiométricas de combustão e

perdas por quedas de pressão, onde FA é então tratado como um gás ideal, e a adição de calor é uma sequência de processos politrópicos.

Apesar de estes modelos já apresentarem certa precisão, para projetos de MCI é ideal que as desvantagens apresentadas sejam cada vez mais minimizadas. Dito isto, o presente trabalho pretende apresentar um novo modelo, com base no modelo de ciclo Otto a Ar-Combustível, considerando os parâmetros elaborados pelo modelo de ciclo Otto de Tempo Finito de Adição de Calor, para simulação de um MCI de ignição por faísca, visando ainda ampliar a gama de combustíveis das tabelas limitadas deste primeiro modelo, reavaliando a normalização por carbono.

Para realizar esta simulação com precisão levando em conta as reações químicas e a não instantaneidade do processo de combustão é necessária alguma ferramenta que possibilite o cálculo instantâneo de propriedades termodinâmicas do FA, como a biblioteca termofísica CoolProp, que apresenta as propriedades termodinâmicas de mais de 120 componentes puros e pseudo-puros, além de permitir o uso de misturas destes (BELL et al., 2014). Todavia, apesar de ampla a gama de substâncias disponíveis, as misturas só funcionam de maneira precisa e adequada para modelos de misturas binárias, sem uma terceira substância, além de combustíveis não catalogados não poderem ser utilizados no modelo. Portanto, esta biblioteca é utilizada neste trabalho apenas como referência para as propriedades dos gases padrões de combustão.

Tendo um meio de obtenção de propriedades termodinâmicas das substâncias necessárias para modelagem deste novo modelo de ciclo Otto, é necessário alguma linguagem de programação que permita a implementação de algoritmos de resolução do ciclo de maneira não tão complexa, porém exata o suficiente. As linguagens de programação abertas, como a linguagem Python, são especialmente favoráveis para isto, visto que além de não possuírem custo algum ao usuário, são conhecidas por seus fóruns de debates, onde os próprios usuários contribuem com seus algoritmos e/ou com sugestões para outros programas de outros usuários. Neste trabalho, é proposto uma implementação do algoritmo do modelo em linguagem Python, mantendo a simplicidade que a plataforma Jupyter Notebook fornece para programas de simulação.

Com a implementação do modelo de ciclo Otto de ar-combustível com tempo finito de adição de calor, as simulações de modelos de motores a quatro tempos começam a ter precisão muito maior quando comparadas com motores reais, abrindo a possibilidade de novos estudos na área de MCI, visto que os resultados propostos por esta simulação não irão finalizar os estudos quanto a diferentes tipos de combustíveis que não possuem carbono em sua estrutura, mas irá direcionar os próximos modelos. As partes físicas e/ou dinâmicas dos motores a partir destes resultados também passam a apresentar grande relevância nos modelos, com a implementação

das medidas do motor para o modelamento do processo de adição de calor, servindo de apoio para futuros modelos que possam trabalhar com a queda de pressão quando há a retirada de calor ao final do ciclo, ou simplesmente para modelos que apresentem métodos melhores do que a divisão em processos politrópicos, alcançando cada vez mais um modelo ideal para projetos de MCI com ignição por centelha.

1.1 OBJETIVOS

Duas diferentes correções para os ciclos Otto são apresentadas a seguir a fim de se aproximar os Ciclos Padrão a Ar dos ciclos reais de funcionamento de motores. Então ao combinar as duas diferentes aproximações, uma tratando-se do combustível utilizado e outra da implementação das dimensões e condições de operação do motor, busca-se obter um método numérico capaz de resolver o Ciclo Otto para motores de combustão interna o mais próximo o possível de um motor real operando. Em suma, os objetivos serão:

Objetivo específico 1: Elaborar modelo matemático que incorpore o método de análise de combustão como reações irreversíveis e o FA como uma mistura de ar-combustível (BRUNETTI, 2012), e incorpore o método de tempo finito de adição de calor (NAAKTGEBOREN, 2017).

Objetivo específico 2: Implementar o modelo em linguagem Python.

Objetivo específico 3: Validar a implementação por simulações.

Objetivo específico 4: Obter a curva de Pressão por Volume de alguns exemplos.

Objetivo Geral: Desenvolver modelo termodinâmico de ciclo Otto capaz de simular um MCI sob as hipóteses discutidas em 1.

1.2 JUSTIFICATIVA

Com todas as hipóteses ainda admitidas pelos modelos de ciclo padrão a ar, ciclo ar-combustível e pelo modelo de tempo finito de adição de calor, há impossibilidade de se fazer um projeto de MCI preciso o suficiente, visto que cada hipótese simplificadora afasta mais o modelo de um MCI operante. Deste fato, provem a necessidade de um melhor modelo de ciclo Otto que permita grande precisão a fim de otimizar e prever possíveis comportamentos de motores que ainda não são encontrados nos modelos já desenvolvidos.

Independentemente dos resultados do presente trabalho, ainda haverá otimizações e mais hipóteses para serem descartadas a fim de se encontrar um modelo ideal para simulações e projetos, como os tipos de combustíveis e quais processos podem ser simulados de diferentes formas. Portanto, este trabalho visa também abrir novas portas para futuros estudos de MCI com ignição por centelha para elaboração de novas ferramentas de simulação.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA COM IGNIÇÃO POR CENTELHA

Os MCI com ignição por centelha são máquinas térmicas que convertem energia termoquímica em trabalho, utilizando a queima de certo FA, composto de ar e combustível, com auxílio de um sistema elétrico para dar início a este processo de combustão. O FA é primeiramente inserido no cilindro em que o pistão se encontra, para ser então comprimido até certo ponto onde a ignição acontece, causando a expansão do FA queimado e movimentando o pistão, que desce gerando trabalho e sobe empurrando os gases da combustão para fora do cilindro, retornando posteriormente ao ponto inicial para que mais FA seja inserido. Estes ciclos de trabalho são chamados de ciclos de operação do motor e são compostos por um conjunto de processos químicos e físicos periódicos, tendo duração angular de 720° , sendo 180° para o pistão subir ao comprimir o FA, mais 180° para descer durante a combustão, 180° ao subir para retirar os gases queimados, e mais 180° ao descer para admitir mais FA, completando ao todo duas voltas no mecanismo biela-manivela (BRUNETTI, 2012). Estes quatro tempos, em um motor alternativo por ignição a faísca, se comportam da seguinte maneira:

- Admissão, para o qual o pistão se move da posição de volume mínimo, também chamada de Ponto Morto Superior (PMS), até a posição de volume máximo, também conhecida por Ponto Morto Inferior (PMI). Nesta etapa a válvula de admissão de combustível se abre, e um gradiente de pressão gerado pela expansão de um volume baixo em que quase não há matéria, irá forçar o combustível do tanque ligado ao cilindro mais o ar atmosférico para dentro do sistema, visto que a válvula que liga estes permitirá a passagem da dosagem correta.
- Compressão, que, como o nome sugere, irá reduzir o volume do sistema do PMI até o PMS, fechando porém a válvula de admissão antes de iniciar este deslocamento. A constrição do FA irá elevar sua temperatura e pressão até um ponto ideal para que a faísca queime este de forma eficaz, sendo esta centelha gerada entre os eletrodos da vela pouco antes de o pistão realmente atingir o PMS.

- Expansão, ocorre devido à combustão liberar uma grande quantidade de energia, que irá aumentar consideravelmente a pressão dentro do cilindro, impulsionando o pistão de volta para o PMI e gerando o trabalho útil desejado para mover a máquina em que o motor está ligado. Parte da combustão pode ocorrer ainda durante a expansão, isto é, quando este tempo se inicia, nem todo o FA já estará queimado.
- Escape, após atingir o PMI devido à expansão do FA, a válvula de escape se abre e o pistão retorna ao PMS, impelindo os gases queimados para fora do cilindro, e então se conclui um ciclo, com o pistão na posição superior e preparado para outra admissão.

Estes ciclos podem ser obtidos em uma operação de um motor utilizando um equipamento chamado indicador de pressão, que obtêm as pressões instantâneas com relação a posição do cilindro, gerando um gráfico de pressão por volume (diagrama $p - V$), ou com relação a posição do virabrequim, que gera um gráfico de pressão por ângulo instantâneo da manivela (diagrama $p - \alpha$). Se apenas um dos diagramas for elaborado, verifica-se que para cada ângulo α há um volume associado, o que permite a elaboração do outro diagrama ainda não elaborado. Estas correlações vem da geometria do cilindro e do pistão do motor, assim como da cinemática envolvida em seu funcionamento (BRUNETTI, 2012). Definindo-se alguns parâmetros primeiramente para a geometria do motor:

S = Curso do pistão, ou distância percorrida entre volumes mínimo e máximo.

V_1 = Volume total, ou máximo, que se refere à posição inferior do pistão, PMI.

V_2 = Volume morto, ou mínimo, ou volume da câmara de combustão, que se refere à posição superior do pistão, PMS.

V_{du} = Volume deslocado, ou cilindrada unitária, que é o volume que o pistão irá realmente movimentar ao percorrer seu curso.

z = Quantidade de cilindros do motor.

D = Diâmetro interno dos cilindros do motor, muitas vezes considerado também diâmetro do pistão para simplificação de cálculos.

V_d = Cilindrada do motor, ou volume deslocado do motor, quantidade de volume movimentada por todo o motor, por todos os pistões.

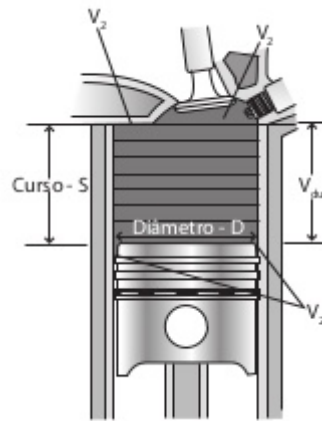


Figura 1: Nomenclaturas referentes às posições do pistão, disponível em (BRUNETTI, 2012).

Pelas definições acima, pode-se definir então matematicamente quanto vale V_{du} , V_d , e r_v , que é a relação volumétrica ou taxa de compressão.

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

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

$$r_v = \frac{V_1}{V_2} \quad (3)$$

Ou então, juntando-se as equações 1 e 3:

$$V_{du} = V_1 - V_2 \Rightarrow V_1 = V_{du} + V_2$$

$$r_v = \frac{V_{du} + V_2}{V_2} = \frac{V_{du}}{V_2} + 1 \quad (4)$$

Reforçando que esta razão representa o quanto a compressão reduz o volume do FA, por isto a divisão do volume máximo pelo mínimo (BRUNETTI, 2012) (NAAKTGEBOREN, 2017). Para a cinemática de funcionamento do motor, mais alguns parâmetros são definidos, de forma que:

r = Raio da manivela do mecanismo de rotação a biela-manivela.

L = Comprimento da biela.

N = Rotação do virabrequim do motor, em rpm.

ω = Velocidade angular do virabrequim.

α = Posição angular da manivela com referência a um eixo vertical ($\alpha = 0^\circ$ quando o pistão se encontra no PMS e $\alpha = 180^\circ$ quando em PMI).

Um ciclo completo, conforme definido por α , irá então ter uma duração angular de 360° , com o módulo da posição angular variando de -180° até 180° . Considerando a posição instantânea do pistão como sendo x , e com referência ao PMS, ou seja, $x = 0$ no PMS, tem-se as equações (BRUNETTI, 2012) (NAAKTGEBOREN, 2017):

$$S = 2 \cdot r \quad (5)$$

$$\omega = \frac{2\pi \cdot N}{60} \quad (6)$$

$$x(\alpha) = r(1 - \cos\alpha) + L \left(1 - \sqrt{1 - \frac{r^2}{L^2} \cdot \text{sen}^2\alpha} \right) \quad (7)$$

Com estas, pode-se definir o volume instantâneo total do FA no cilindro como:

$$V(\alpha) = V_2 + \frac{\pi \cdot D^2}{4} x(\alpha) = V_2 + \frac{\pi \cdot D^2}{4} \left[r(1 - \cos\alpha) + L \left(1 - \sqrt{1 - \frac{r^2}{L^2} \cdot \text{sen}^2\alpha} \right) \right] \quad (8)$$

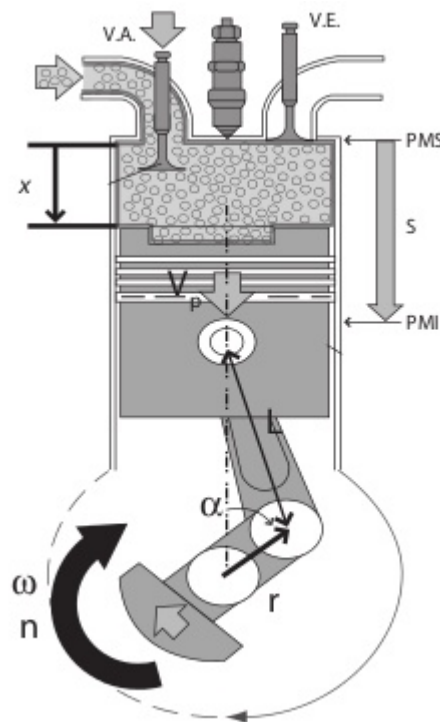


Figura 2: Nomenclaturas referentes a cinemática do pistão, disponível em (BRUNETTI, 2012).

Desse modo a conexão entre o volume e a posição angular está definida de forma que é possível se obter um a partir do outro. Os resultados experimentais de testes e simulações com

MCI são comumente apresentados não só por estas curvas de $p - V$ e $p - \alpha$ separadamente, mas também pela superfície (p, n, α) , Pressão - Rotação - Posição Angular, que permite uma análise mais detalhada de cada instante do ciclo para diferentes condições de operação. Um exemplo desta superfície está exposta a seguir.

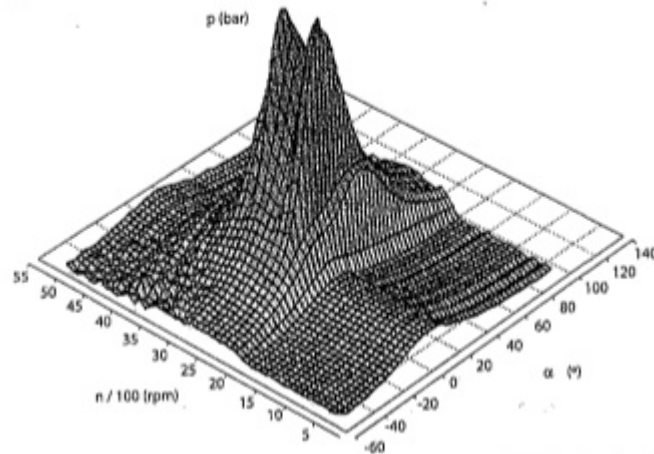


Figura 3: Superfície $P - \alpha - n$ real, disponível em (BRUNETTI, 2012).

Quando observado um diagrama real de um ciclo de MCI, verifica-se que a partir do momento que a faísca é gerada pouco antes do PMS, a pressão possui um aumento rápido e bastante elevado em rotações próximas de 3000 rpm, formando quase uma reta vertical no plano de $p - \alpha$, fato este que será considerado mais adiante em uma idealização para modelar o processo de combustão como sendo isocórico.

2.2 MODELAGEM TERMODINÂMICA

2.2.1 HIPÓTESES DO CICLO PADRÃO A AR

Os processos reais de operação de determinado motor são demasiadamente complexos para serem analiticamente desenvolvidos com as leis da termodinâmica atuais, devido à mudança das propriedades termodinâmicas do FA enquanto este é submetido aos processos do ciclo. Sendo assim, os modelos de ciclos Otto foram criados sob algumas idealizações a fim de simplificar ao máximo os ciclos de operação. O modelo de ciclo Otto Padrão a Ar recebe este nome a partir da primeira hipótese de simplificação, que é o FA como sendo ar puro. Estas chamadas hipóteses simplificadoras são sete, e estão listadas a seguir (BRUNETTI, 2012).

- 1- O FA para o ciclo é Ar puro.
- 2- Este ar obedece as relações e comportamentos de um gás ideal.

- 3- As etapas de admissão e escape são desconsideradas, visto que não haverá necessidade de trocar gases queimados por um novo ar.
- 4- A compressão e a expansão do ciclo são processos isentrópicos, nos quais não há qualquer tipo de troca de calor com o meio, além de serem reversíveis.
- 5- O processo de combustão transcorre a pressão constante para o ciclo Diesel e a volume constante para o ciclo Otto, passando a ser um comum processo de adição de calor por uma fonte quente.
- 6- O escape é substituído por uma retirada de calor a volume constante por uma fonte fria.
- 7- Não só os processos de compressão e expansão, mas também a adição e remoção de calor são reversíveis.

Estas hipóteses modificam boa parte do ciclo de operação anteriormente descrito, necessitando uma redefinição de quais processos ocorrem, e como esta modificação auxilia a modelagem do ciclo Otto.

2.2.2 CICLO OTTO PADRÃO A AR

Reformulando os processos então para o ciclo Otto aplicado as condições de 2.2.1 em um diagrama $p - V$, tem-se:

- Compressão, que sendo um processo isentrópico será representado por uma curva de equação $P \cdot V^k = constante$. A área limitada por esta curva e o eixo V representa o trabalho de compressão, W_{compr} , que é exercido sobre o sistema de um ponto de vista termodinâmico.
- Adição de calor, que assume-se como sendo a volume constante, apesar de nesta o FA que é o ar não entrar realmente em processo de combustão, mas apenas simula a geração de calor desta reação química, o conceito de processo isocórico vem da rápida combustão do processo real, que permite esta aproximação para fins didáticos. Considera-se que um total de $Q_{admitido}$ de calor é fornecido.
- Expansão, assim como a compressão se trata de um processo isentrópico, e como tal possui equação da forma $P \cdot V^k = constante$. Neste caso, a área limitada pela curva e o eixo de volume é equivalente ao trabalho de expansão do sistema, W_{exp} , que é exercido pelo sistema, também considerando a termodinâmica.

- Remoção de calor, o último processo do ciclo, que tem a função de fazer o ar do sistema voltar às condições iniciais, como se o ar "queimado" fosse substituído por ar nas condições iniciais. Este processo dá-se a volume constante, e considera-se que uma fonte fria gera uma diminuição da pressão ao se reduzir a temperatura do FA. Considera-se que um total de $Q_{retirado}$ de calor é removido.

Nas equações anteriores k é a razão entre calores específicos a volume e pressão constantes $\left(k = \frac{c_p}{c_v}\right)$. Tendo o trabalho obtido da expansão, o trabalho gasto com a compressão, a quantidade de calor adicionada ao sistema, e a quantidade de calor retirada do ar, é possível encontrar o trabalho útil que será aproveitado para realmente movimentar a máquina térmica, assim como o calor útil para o sistema (BRUNETTI, 2012):

$$W_{util} = W_{exp} - W_{compr} \quad (9)$$

$$Q_{util} = Q_{admitido} - Q_{retirado} \quad (10)$$

Pela Primeira Lei da Termodinâmica, para um sistema sem variação de energia cinética e potencial de qualquer forma, tem-se a relação:

$$Q - W = U_{final} - U_{inicial} \quad (11)$$

Onde U é a energia interna do sistema. Para um ciclo completo, a energia interna volta às condições iniciais, logo:

$$U_{final} = U_{inicial} \rightarrow Q_{util} = W_{util} \rightarrow W_{util} = Q_{admitido} - Q_{retirado} \quad (12)$$

A Segunda Lei da Termodinâmica entra em vigor no sistema, mostrando que não é possível transformar todo o calor fornecido em trabalho, o que garante a validade da definição da eficiência térmica do motor a ciclo Otto a partir da Primeira Lei da Termodinâmica, matematicamente definida por (BRUNETTI, 2012):

$$\eta_t = \frac{W_{util}}{Q_{admitido}} = \frac{Q_{admitido} - Q_{retirado}}{Q_{admitido}} = 1 - \frac{Q_{retirado}}{Q_{admitido}} \quad (13)$$

que mostra a capacidade do motor em converter energia térmica ou química em energia mecânica útil, nunca chegando em 100% devido ao calor removido nunca ser nulo para que o ar volte às condições iniciais ao final do ciclo (BRUNETTI, 2012).

Para a explicação do método de tempo finito de adição de calor que segue, vale lembrar que as propriedades intensivas dos gases podem ser obtidas se dividindo as propriedades acima

pela massa, m , de FA do sistema, isto é:

$$v = \frac{V}{m} \quad (14)$$

$$w = \frac{W}{m} \quad (15)$$

$$q = \frac{Q}{m} \quad (16)$$

$$u = \frac{U}{m} \quad (17)$$

onde v , w , q e u representam o volume específico, o trabalho específico, o calor específico e a energia interna específica do sistema, respectivamente (BRUNETTI, 2012) (CENGEL; BOLES, 2002).

2.2.3 TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE CALOR

Apesar do modelo de Ciclo Otto Padrão a Ar retornar diversas características qualitativas dos motores, e até algumas quantitativas para alguns casos, a aproximação isocórica da ignição do FA só pode ocorrer em dois casos particulares de funcionamento do motor, que é quando o virabrequim gira imensuravelmente devagar, garantindo que a combustão ocorra com o pistão praticamente parado, ou quando o processo de reação do FA acontece em um tempo infinitamente pequeno, podendo ser considerado instantâneo, e nenhuma destas duas hipóteses acontecem de fato em um sistema real. Caso fosse possível aplicar estas características a um motor, a rotação ou velocidade de operação do motor não iria fazer diferença alguma, sendo desprezível para o primeiro caso e inútil para o segundo caso, visto que de qualquer forma a combustão iria ser instantânea, fornecendo sempre a mesma quantidade de trabalho ao sistema. Para resolver este problema o método do modelo de Tempo Finito de Adição de Calor (*finite – time heat addition*) considera que a combustão demora um tempo Δt_c para ocorrer completamente, e o pistão continua seu movimento durante este tempo, resultando em um processo termodinâmico que possui ambos variação de calor e trabalho, e não apenas um, como na compressão, expansão e remoção de calor, porém considerando este novo tempo reversível assim como os outros (NAAKTGEBOREN, 2017).

Esta condição da etapa de combustão possuir trabalho e entrada de calor faz com que todas as propriedades termodinâmicas sejam variáveis, tornando a solução analítica complexa e inviável. Portanto, o método divide este processo em uma série de processos politrópicos de expoentes n_i , isto é:

$$PV_i^{n_i} = C_i(\text{constante}) \quad (18)$$

Onde i representa o estado atual do estudo, que é conhecido, e $i + 1$ seria o estado seguinte que se deseja obter para fechar o ciclo (NAAKTGEBOREN, 2017). Sendo assim, os três processos em que há trabalho ocorrendo podem ser aproximados por este conjunto de processos politrópicos, e o processo de remoção de calor pode ser resolvido conforme o cálculo teórico do modelo de ciclo padrão a ar prevê. Aplicando-se a primeira lei da termodinâmica para cada uma das transformações politrópicas, e com auxílio de métodos numéricos computacionais, há uma rápida resolução do método definindo apenas as condições de início do processo, e também um chute inicial do valor do expoente n_i , que será corrigido quantas vezes for necessário para uma tolerância aceitável (NAAKTGEBOREN, 2017).

Se a rotação do motor for considerada constante, então pela equação 6 a velocidade angular também possuirá módulo constante, e tendo o tempo de combustão, pode-se definir a duração angular do processo de adição de calor, em *rad*.

$$\delta = \omega \Delta t_c \quad (19)$$

Isto é, supondo que a adição de calor comece em um ângulo θ , em *rad* e chamado de ângulo de ignição, esta irá terminar em $\theta + \delta$, em *rad* também (NAAKTGEBOREN, 2017). Tendo esta limitação, o calor admitido a cada passo angular pode ser obtido por meio de uma função $y(\alpha)$, que representa a fração deste calor para a posição α . Todavia, para os processos de compressão e expansão não são considerados entrada e/ou saída de calor, então a fração deverá ser 0 para este primeiro e 1 para o segundo, indicando que até o final da compressão calor algum é admitido no sistema, e no início da expansão todo o calor possível de ser fornecido pela reação já foi inserido; e para o processo intermediário, isto é, para a adição propriamente dita, um modelo de função qualquer $g(\alpha)$ é utilizado.

$$y(\alpha) = \begin{cases} 0, & \text{para } \alpha < \theta \\ g(\alpha), & \text{para } \theta \leq \alpha \leq \theta + \delta \\ 1, & \text{para } \alpha > \theta + \delta \end{cases} \quad (20)$$

E então, o calor adicionado ao sistema do início da combustão até uma posição α dentro dos limites desta, irão possuir intensidade:

$$q(\alpha) = q_{ent} y(\alpha) \quad (21)$$

Onde q_{ent} é o módulo do calor por unidade de massa total inserido até o final da etapa de admissão, cujo valor é conhecido por estar utilizando uma fonte externa de calor como referência (NAAKTGEBOREN, 2017). Sendo então, considerando as equações 14 a 17, q_i

e w_i o calor e trabalho específicos admitidos ou gerados no i -ésimo processo politrópico, u_i a energia interna específica no estado i em que se inicia este processo, e u_{i+1} a energia ao final do mesmo, uma aplicação da primeira lei da termodinâmica resulta em:

$$q_i + w_i = \Delta u_i = u_{i+1} - u_i \quad (22)$$

Para a compressão e para a expansão, conforme já explicitado, não haverá introdução ou remoção de calor, tendo então $q_i = 0$, e ainda pela definição de q_i é possível se obter analiticamente a relação:

$$q_i = q_{ent} \cdot (y(\alpha_{i+1}) - y(\alpha_i)) \quad (23)$$

Considerando como foi estabelecidos os limites de α , chama-se de compressão o estágio em que $-\pi < \alpha < \theta$, de adição de calor onde $\theta \leq \alpha \leq \theta + \delta$, e de expansão onde $\theta + \delta < \alpha \leq \pi$, e, escolhendo certa quantidade de processos politrópicos para cada tempo, define-se as constantes arbitrárias N_s e N_q , quantidade de transformações para resolver os processos isentrópicos e quantidade para resolver a combustão, respectivamente (NAAKTGEBOREN, 2017). Com isto, α_i e α_{i+1} são encontrados utilizando os intervalos enquadrados por estas constantes, o que permite se encontrar não só os valores de q_i , mas também os valores de $V(\alpha_i)$, que serão necessários para se calcular w_i .

$$\alpha_i = \begin{cases} -\pi + i \frac{\theta - \pi}{N_s} & \text{para } 0 \leq i < N_s \\ \theta + (i - N_s) \frac{\delta}{N_q} & \text{para } N_s \leq i \leq N_s + N_q \\ \theta + \delta + (i - N_s - N_q) \frac{\pi - \theta - \delta}{N_s} & \text{para } N_s + N_q < i \leq 2N_s + N_q \end{cases} \quad (24)$$

Tendo α_i é possível calcular o volume específico do sistema, pela definição 14, $v_i = V(\alpha_i)/m$, porém para se obter $y(\alpha_i)$ ainda há necessidade de definir um comportamento para $g(\alpha)$ na equação 20 (NAAKTGEBOREN, 2017). Considerando prévios estudos na área de ignição em motores de combustão interna, uma aproximação plausível seria uma função senoidal, deixando a função $y(\alpha)$ com a forma:

$$y(\alpha) = \begin{cases} 0, & \text{para } \alpha < \theta \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi}{\delta}(\alpha - \theta)\right), & \text{para } \theta \leq \alpha \leq \theta + \delta \\ 1, & \text{para } \alpha > \theta + \delta \end{cases} \quad (25)$$

Quanto ao trabalho específico da equação 22, a definição de deslocamento vezes a força aplicada resultando em trabalho, em conjunto com a definição 18 de processos politrópicos,

retornam a integral:

$$w_i = \int_{v_i}^{v_{i+1}} C_i v^{-n_i} dv = \frac{P_i}{1 - n_i} \left(v_i - \frac{v_i^{n_i}}{v_{i+1}^{n_i-1}} \right) \quad (26)$$

Para a energia interna específica no estado i , considerando conhecida a temperatura e pressão deste, pela equação 47 e sabendo que a definição de calor específico a pressão constante, c_p é dada pela derivada em função da temperatura desta entalpia, o calor específico a volume constante, c_v , é dado pela derivada de u com relação a temperatura, e ainda, que a diferença destes calores específicos é igual a constante do gás de trabalho, R , tem-se:

$$c_p = \frac{dh}{dT} \quad (27)$$

$$c_v = \frac{du}{dT} \quad (28)$$

Estas derivadas são função de apenas temperatura por se tratar de gases ideais em trabalho (BRUNETTI, 2012).

$$u_i(T_i) = \int_{T_{ref}}^{T_i} c_v(T) dT = \int_{T_{ref}}^{T_i} (c_p(T) - R) dT = \int_{T_{ref}}^{T_i} \left(\frac{dh}{dT} - R \right) dT \quad (29)$$

Lembrando que a entalpia pode ser representada por um polinômio, cujos coeficientes são tabelados para cada gás ideal ou substância pura que se deseja, podendo ser encontrada também com auxílio de uma biblioteca de propriedades termofísica, como, por exemplo, a CoolProp, e considerando que a temperatura de referência, T_{ref} , é de 0K (BRUNETTI, 2012) (NAAKTGEBOREN, 2017) (BELL et al., 2014).

Apresentadas todas as relações acima, assumindo um valor inicial arbitrário para n_i , a equação 22 se reduz a uma simples soma e subtração que retorna o valor de u_{i+1} , e, a partir deste, é possível se encontrar o valor de T_{i+1} pela equação 29, utilizando um método numérico como o de Newton-Raphson (NAAKTGEBOREN, 2017). Tomando uma temperatura T^O qualquer, utilizando as equações 28 e 29 para se obter $c_v(T^O)$ e $u(T^O)$, e aplicando o método numérico citado para u_{i+1} , é possível se obter T_{i+1} .

$$T(u) = T^O + \frac{u - u(T^O)}{c_v(T^O)} \quad (30)$$

Estimando-se $T^O = T(u)$ o método prossegue até que uma tolerância aceitável seja atingida, e, considerando que o fluido de trabalho é um gás ideal, com a temperatura no estado $i + 1$ bem definida, basta aplicar a lei dos gases ideais para se encontrar a pressão neste estado, P_{i+1} (NAAKTGEBOREN, 2017). Todavia, como o coeficiente n_i foi assumido, este precisa

ser corrigido. Supondo este como uma variável, a implementação da equação 26 na equação 22 iria resultar em uma relação não linear complexa demais de ser resolvida analiticamente para n_i e u_{i+1} , e mesmo que haja uma relação fixa conhecida para a energia interna específica que dependa do volume específico e da pressão instantânea, a combinação desta com a definição 18 resultaria em uma equação para n_i ainda complexa de se resolver. Então, o modelo de tempo finito de adição de calor define a conjectura da consistência termodinâmica:

Conjectura 1. (*Consistência Termodinâmica*) Para uma transferência de calor definida pela equação 23, existirá apenas um coeficiente politrópico que, quando aplicado à definição $Pv^{n_i} = C_i(\text{constante})$, irá partir do ponto i e irá até o estado $i + 1$ executando o trabalho w_i dado pela equação 26, e respeitando a variação da energia interna específica do sistema $\Delta u_i = u_{i+1} - u_i$ que é termodinamicamente coerente com as equações de estado $P - v$ em ambos os lados da transformação e que ainda satisfaz o balanço de energia da relação 22 (NAAKTGEBOREN, 2017).

Portanto, utilizando a relação 18, tem-se um meio de corrigir este coeficiente politrópico, visto que $P_i v_i^{n_i} = P_{i+1} v_{i+1}^{n_i}$, aplicando-se uma relação logarítmica é possível isolar n_i , obtendo uma relação para este. De um ponto de vista computacional, um novo *loop* pode ser definido aqui a partir disto: se i representa as $2N_s + N_q$ transformações politrópicas, uma variável j pode definir quantas vezes o coeficiente politrópico n_i irá ser corrigido até certa tolerância, então este expoente passa agora a ser representado por n_i^j , assim como a energia interna específica, a pressão, e a temperatura do estado $i + 1$ e o trabalho específico do processo também serão recalculados conforme j varia, isto é, a partir deste ponto $u_{i+1} \rightarrow u_{i+1}^j$; $P_{i+1} \rightarrow P_{i+1}^j$; $T_{i+1} \rightarrow T_{i+1}^j$, e $w_i \rightarrow w_i^j$ e então n_i^{j+1} será:

$$n_i^{j+1} = \frac{\log \frac{P_{i+1}^j}{P_i}}{\log \frac{v_i}{v_{i+1}^j}} \quad (31)$$

O modelo de tempo finito de adição de calor ainda sugere para um valor inicial para o coeficiente politrópico que se utilize $n_i^0 = k(T_i) = c_p(T_i)/c_v(T_i) = 1 - R_{gas}/c_v(T_i)$, e este *loop* em j segue até que certa tolerância ϵ_w estabelecida seja atingida para o trabalho específico w_i^j , isto é, $|w_i^{j-1} - w_i^j| \leq \epsilon_w$. Uma possível falha em simplesmente aplicar este método seria que para determinado número N_q , pode haver um dos processos politrópicos que ocorra a volume constante, visto que durante a ignição ainda há uma redução de volume para depois este crescer, então há necessidade de haver esta verificação a fim de se evitar que $\log \frac{v_i}{v_{i+1}} = 0$. No caso de transformação isocórica, o método deve retroceder à teoria original de ciclos padrão a ar, assim como na remoção de calor, considerando $w_i = 0$ e $u_{i+1} = u_i + q_i$, sem necessidade de correção do expoente politrópico (NAAKTGEBOREN, 2017).

Portanto, seguindo estes passos o método de adição de calor a tempo finito pode ser solucionado, encontrando-se todas as pressões, temperaturas, volumes específicos e etc., necessários para se completar o modelo de ciclo Otto para combustão com ignição por centelha, permitindo a modelagem não só utilizando estes parâmetros termodinâmicos, mas também os geométricos que antes não possuíam influência alguma nestes processos.

Visando a validação do modelo, uma implementação em linguagem Python deste modelo de Tempo Finito de Adição de Calor foi realizada e uma simulação foi testada (NAAKTGEBOREN, 2017), comparando-a com um modelo de ciclo Otto padrão a ar analiticamente resolvido para constante $k = 1.3343$ e razão de compressão $r = 8$, cuja eficiência térmica é de $\eta_t = 50.098\%$. Os parâmetros de simulação do modelo foram definidos da seguinte forma: as constantes r e k foram as mesmas do modelo de ciclo Otto padrão a ar de referência, a duração da ignição foi escolhida como $\delta = 0.01^\circ$ e o ângulo de ignição foi de $\theta = -\delta/2$, tornando a ignição quase instantânea, o pistão foi escolhido como tendo seção quadrada, isto é, $D = S$, as quantidades de processos foram $N_s = 180$ e $N_q = 2$, o volume deslocado foi definido como sendo 250 cm^3 , e as condições de admissão do ar foram de $T_0 = 300\text{K}$ e $P_0 = 100\text{KPa}$. O diagrama $P - v$ resultante está exposto na figura 4

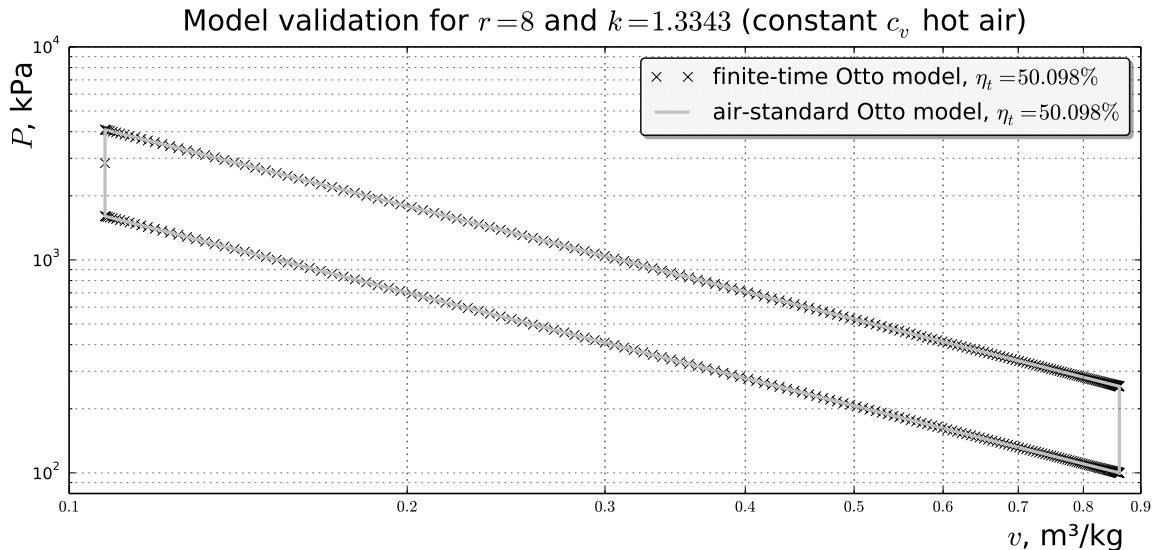


Figura 4: Diagramas $P-v$ resultantes dos modelos de ciclo padrão a ar (linhas) e ciclo Otto de tempo finito de adição de calor (marcas) em escala log-log, para $r = 8$ e $k = 1.3343$, disponível em (NAAKTGEBOREN, 2017).

Como as eficiências térmicas não possuem diferença alguma para até cinco algarismos significativos o modelo pode ser utilizado para se reescrever os ciclos Otto de padrão a ar desde que uma duração angular de adição de calor suficientemente pequena seja utilizada, validando a precisão do modelo.

As simulações realizadas em (NAAKTGEBOREN, 2017) apresentam resultados para diferentes durações angulares de adição de calor, considerando fixos os valores de razão de compressão e ângulo de ignição, gerando, por exemplo, o diagrama $T - v$ a seguir, com as eficiências térmicas correspondentes para cada δ .

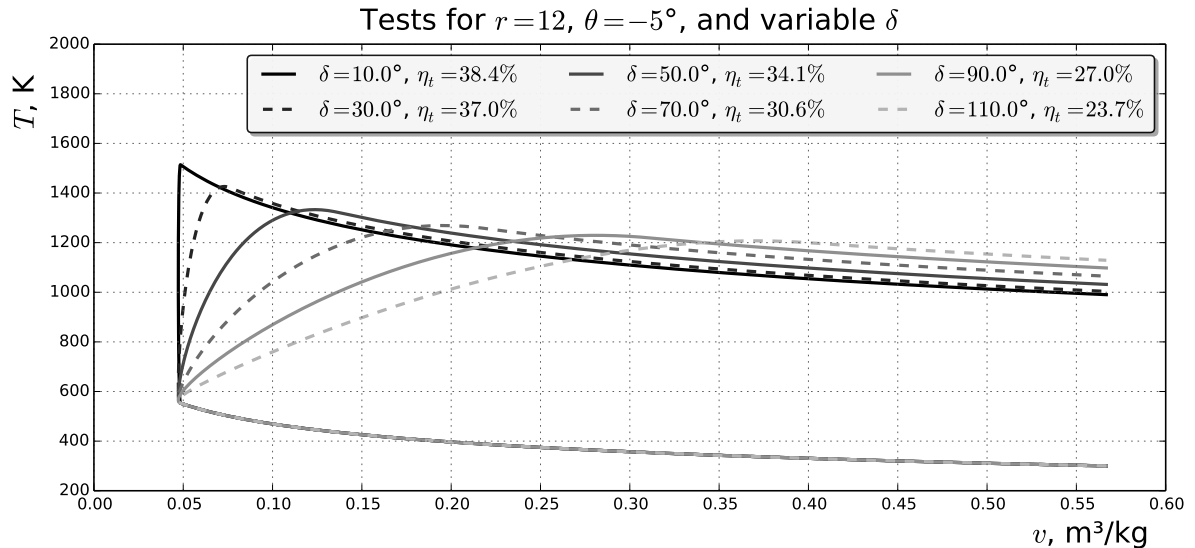


Figura 5: Diagrama $T - v$ para $r = 12$ e $\theta = -0.5$, disponível em (NAAKTGEBOREN, 2017).

2.2.4 MODELO DE CICLO OTTO AR-COMBUSTÍVEL

Em qualquer estudo químico atual as equações químicas são essenciais para definir as características quantitativas dos componentes em estudo. O balanceamento destas equações possui justamente a função de obter estas informações ao se equilibrar as quantidades de massas de reagentes (compostos antes do processo) e produtos (compostos após o processo) nas reações químicas de pesquisa, visto que, como definido por Antoine Lavoisier (1743-1794), durante o século XVIII na lei da conservação de massa, nenhuma matéria se cria ou se perde na natureza, fazendo com que as quantidades de átomos nos dois lados destas equações em equilíbrio sejam as mesmas (KOTZ, 2009). Esta proporcionalidade entre as massas das diferentes moléculas presentes nas reações químicas é chamada de estequiometria, que por sua vez é caracterizada pelos coeficientes estequiométricos que acompanham as moléculas em ambos lados da equação, como, por exemplo, na reação básica de produção de água abaixo.

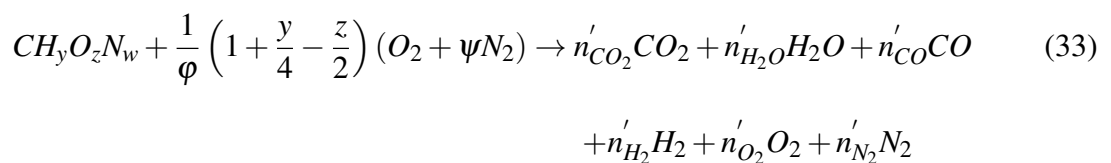


Onde os coeficientes estequiométricos para o gás hidrogênio, para o gás oxigênio e para a água, são respectivamente 2, 1 e 2.

Na análise de motores de combustão, estas reações químicas possuem como principal reagente algum tipo de combustível que gera uma considerável liberação de calor, por isto a denominação desta equação química passa a ser combustão ou queima. Essencialmente, esta queima ocorre misturando certa quantia de moléculas de combustível com uma quantia estequiométrica aceitável de gás oxigênio, produzindo-se moléculas de óxidos, no caso de reagentes a base de hidrocarbonetos estes produtos serão dióxido de carbono e água (KOTZ, 2009). Os hidrocarbonetos são compostos a base de carbono e hidrogênio, que são citados aqui com certa ênfase devido ao fato de diversos destes estarem presentes na gasolina e em outros combustíveis utilizados atualmente, em forma de octano, C_8H_{18} , propano, C_3H_8 , butano, C_4H_{10} , entre outros, e também podem ser encontrados ligados a hidróxidos em forma de álcoois, como no metanol, CH_4O e no etanol, C_2H_6O (KUNZ et al., 2007).

No caso de combustíveis derivados do petróleo, onde os hidrocarbonetos estão presentes em larga escala, podendo ter até 20 átomos de carbono e mais alguns de enxofre e nitrogênio, há uma preocupação quanto à formação de moléculas de óxido nítrico, NO , que por sua vez pode reagir com oxigênio na presença de reações exotérmicas, gerando dióxido de nitrogênio, NO_2 , que não só é um gás venenoso com alto índice de impacto ambiental por si só, mas também pode reagir com a água e gerar ácido nítrico HNO_3 , que é um ácido forte e corrosivo (KOTZ, 2009). As quantidades de enxofre e outros componentes altamente tóxicos passam a ser mais relevantes quando se estuda combustíveis mais naturais e rochosos, como o carvão ou até mesmo alguns gases naturais, então uma forma genérica de se definir uma molécula de combustível a base de petróleo seria $CH_yO_zN_w$, onde y, z e w são as frações de suas respectivas substâncias com relação ao carbono, isto é, H/C , O/C e N/C , respectivamente (BRUNETTI, 2012) (MARTIN; HEYWOOD, 1977).

Para a molécula de combustível queimar, uma quantidade de oxigênio deve estar presente, assim como os eletrodos de uma vela, que geram uma faísca no sistema (BRUNETTI, 2012). Sendo assim, uma quantia de ar normalmente é misturada ao combustível durante os processos de combustão, gerando a reação descrita pela equação 33 abaixo, também chamada de processo de combustão.



Onde:

$$\phi = \frac{\text{razão} - \text{combustível} - \text{ar}_{real}}{\text{razão} - \text{combustível} - \text{ar}_{estequiométrica}} \quad (34)$$

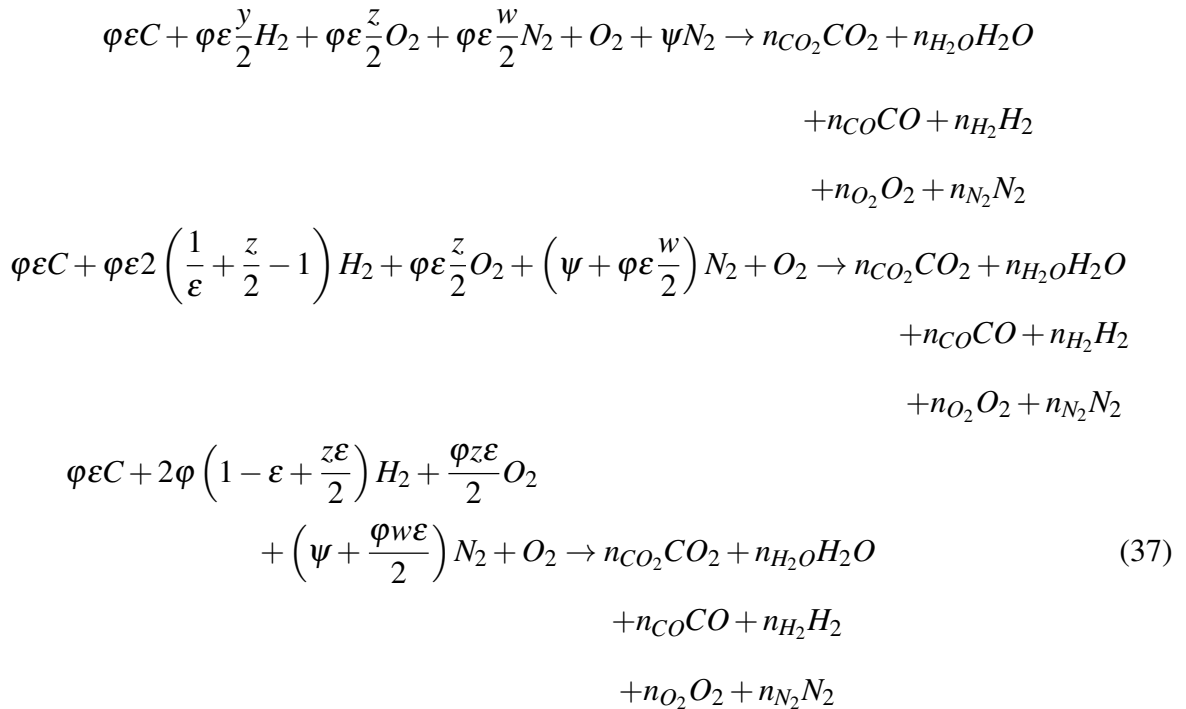
Tratando a molécula de combustível como sendo:



E ainda adotando-se:

$$\varepsilon = \frac{1}{1 + \frac{y}{4} - \frac{z}{2}} \quad (36)$$

Onde n'_i representa o número de mols do i -ésimo produto para a combustão de 1 mol de combustível em uma razão de equivalência combustível-ar φ ; e ψ define uma proporção entre as frações de gás nitrogênio e de gás oxigênio na atmosfera a nível molecular, sendo utilizado comumente o valor 3,76. Essa modelagem para o ar, assim como a dissociação de hidrocarbonetos que será desenvolvida a seguir foi proposta por Martin (MARTIN; HEYWOOD, 1977), que desenvolveu as reações químicas e encontrou uma maneira de se encontrar as propriedades termodinâmicas destes produtos (BRUNETTI, 2012). Multiplicando-se a equação 33 por $\varphi\varepsilon$, e arranjando a reação para que não haja dependência direta de y , isto é, isolando $y/2$ na equação 36 e substituindo em 33, obtem-se:



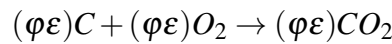
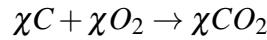
Com n_i definindo nesta o número de mols de cada componente por mol de gás O_2 no ar, ou, matematicamente: $\varphi\varepsilon n'_i = n_i$.

Para que todo o combustível fosse queimado e transformado em produto, a quantidade de oxigênio no ar deveria ser estequiométrica, ou perfeita para o equilíbrio, porém nem sempre a atmosfera permite que haja esta quantia disponível (BRUNETTI, 2012). Sendo assim, a razão

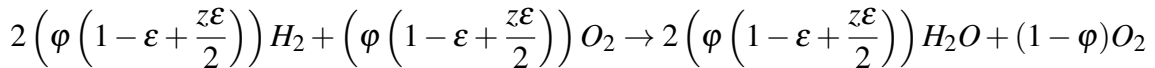
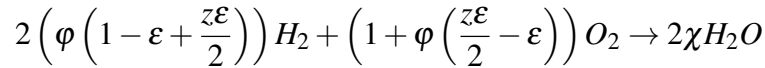
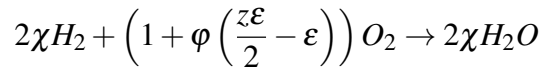
de equivalência define dois tipos diferentes de mistura quanto a qualidade do ar.

- Misturas pobres ou estequiométricas, $\varphi \leq 1$: Estas misturas possuem excesso de O_2 , e, portanto, as quantidades de CO e H_2 na relação de produtos são consideradas desprezíveis.

Realizando o balanceamento químico para $n_{CO} = 0$ e $n_{H_2} = 0$, pode-se obter quantidades de CO_2 e H_2O da seguinte forma:



Como n_{CO} é nulo, pode-se assumir que todo carbono é gasto nesta reação, e como nos reagentes há uma quantia de $(\varphi \varepsilon)$ de carbono, a mesma quantia de gás O_2 será utilizada. Como inicialmente havia $(1 + \frac{\varphi z \varepsilon}{2}) O_2$ na mistura, após a reação acima haverá $(1 + \frac{\varphi z \varepsilon}{2} - \varphi \varepsilon)$, que será gasta na geração de água, obedecendo-se a reação da equação 32.



Como toda a quantia de H_2 deve ser utilizada, uma quantia $(\varphi (1 - \varepsilon + \frac{z\varepsilon}{2}))$ de gás oxigênio é gasta, resultando em uma sobra de $(1 - \varphi)$ de O_2 . Com estes cálculos, já é possível se obter todas as quantias de produtos resultantes da combustão da equação 37, gerando a tabela 1 a seguir.

Tabela 1: Coeficientes estequiométricos para mistura pobre ou estequiométrica.

CO_2	$\varphi \varepsilon$
H_2O	$2\varphi \left(1 - \varepsilon + \frac{z\varepsilon}{2}\right)$
CO	0
H_2	0
O_2	$1 - \varphi$
N_2	$\psi + \varphi \varepsilon \frac{w}{2}$
total	$\varphi \left(1 - \varepsilon + z\varepsilon + \frac{w\varepsilon}{2}\right) + 1 + \psi$

Este total representa a quantidade molar de gases queimados no sistema, que será útil para se calcular as propriedades termodinâmicas desta mistura.

- Misturas ricas, $\varphi > 1$: Para estas a escassez de O_2 é o foco de estudo, pois a queima

não completa dos gases geram CO e H_2 nos produtos, consumindo todo o gás oxigênio disponível nos reagentes.

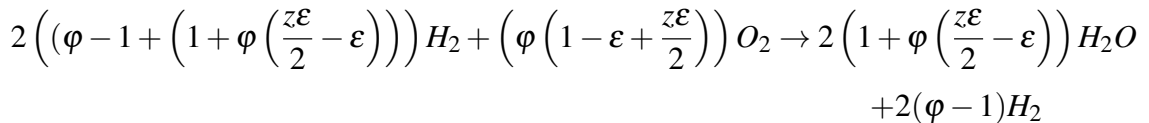
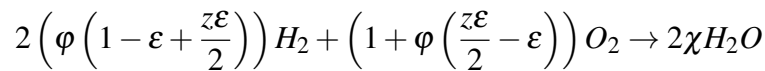
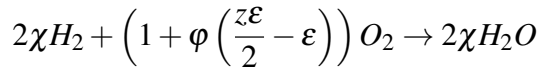
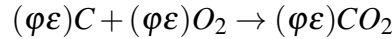
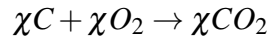
Para este caso, a reação de produção de CO provem da reação do dióxido de carbono com átomos de H_2 , visto que há uma sobra destes últimos devido à falta de gás oxigênio. Então a equação:



Deve obedecer a constante de proporção:

$$K(T) = \frac{n_{H_2O}n_{CO}}{n_{CO_2}n_{H_2}} \quad (39)$$

Apesar de estar categorizada como uma função da temperatura, muitas vezes esta constante é admitida como sendo um valor fixo em aplicações de motores de combustão interna (BRUNETTI, 2012). Adotando $n_{CO} = c$ para realizar novamente o balanceamento da reação 37, encontra-se as quantidades dos produtos:



Para esta última reação, considerando que $\left(\varphi \left(1 - \varepsilon + \frac{z\varepsilon}{2}\right)\right)$ é a quantidade total de oxigênio do sistema, e deve ser queimada, acaba sobrando uma quantia $2(\varphi - 1)$ de gás hidrogênio, que é utilizada então na produção de monóxido de carbono. Logo uma quantia c de CO_2 e H_2 é utilizada para gerar uma quantia c de água e CO , resultando na tabela 2 abaixo.

Desta tabela, retira-se os valores de n_{CO_2} , n_{H_2O} e n_{H_2} nos produtos e aplica-os na equação 39 para se encontrar o valor de c .

$$K = \frac{(2(1 - \varphi\varepsilon) + z\varepsilon\varphi + c)c}{(\varphi\varepsilon - c)(2(\varphi - 1) - c)}$$

Tabela 2: Coeficientes estequiométricos para mistura rica.

CO_2	$\varphi\varepsilon - c$
H_2O	$2(1 - \varphi\varepsilon) + z\varepsilon\varphi + c$
CO	c
H_2	$2(\varphi - 1) - c$
O_2	0
N_2	$\psi + \varphi\varepsilon\frac{w}{2}$
total	$\varphi(2 - \varepsilon + z\varepsilon + \frac{w\varepsilon}{2}) + \psi$

$$(\varphi\varepsilon K - cK)(2\varphi - 2 - c) = 2c - 2\varphi\varepsilon c + z\varphi\varepsilon c + c^2$$

$$2\varphi^2\varepsilon K - 2\varphi\varepsilon K - \varphi\varepsilon Kc - 2\varphi Kc + 2Kc + Kc^2 = 2c - 2\varphi\varepsilon c + z\varphi\varepsilon c + c^2$$

Reorganizando e invertendo alguns sinais, tem-se a equação de segundo grau:

$$(1 - K)c^2 + (2(1 - \varphi\varepsilon) + K(2(\varphi - 1) + \varphi\varepsilon) + z\varphi\varepsilon)c + 2K\varphi\varepsilon(1 - \varphi) = 0 \quad (40)$$

Que pode ser resolvida rapidamente para c pela equação de bháskara caso K seja conhecido (um possível valor é aproximadamente 3,5 para 1740 K, de acordo com (HEYWOOD, 1988)). Considerando-se ambos tipos de mistura, o mínimo de carbono presente no sistema é de c para a produção de CO e/ou CO_2 , podendo ser algum múltiplo também deste valor, então admite-se que cx seja a quantidade de átomos de carbono para cada molécula da mistura, e, conseqüentemente, a quantidade de mols de combustível por mol de O_2 no ar é de $\frac{\varepsilon\varphi}{cx}$ (BRUNETTI, 2012). Em um motor genérico operando em um ciclo a combustão, após a ignição do combustível há um processo de escape, em que os produtos queimados são retirados do sistema e novos reagentes são inseridos. Contudo, parte desta massa de produtos já utilizados nem sempre é retirada do sistema, denominada por alguns autores como "gases residuais". Chamando esta porcentagem de gases queimados de ζ , pode-se reescrever a mistura de ar-combustível (parte esquerda da Eq. 33) da forma:

$$(1 - \zeta) \left(\frac{\varepsilon\varphi}{cx} CH_y O_z N_w + O_2 + \psi N_2 \right) + \zeta (n_{CO_2} CO_2 + n_{H_2O} H_2O + n_{CO} CO + n_{H_2} H_2 + n_{O_2} O_2 + n_{N_2} N_2) \quad (41)$$

Com isto, uma nova tabela para n_i pode ser elaborada, para se obter o total de mols dependendo de φ , que é a tabela 3 a seguir.

E assim, com todas as possíveis frações dos componentes é possível iniciar uma análise da massa específica da substância como um todo, visto que pela massa molecular dos reagentes

Tabela 3: Coeficientes estequiométricos para misturas pobres, estequiométricas ou ricas.

Componente	$\varphi \leq 1$	$\varphi > 1$
CO_2	$\zeta \varphi \varepsilon$	$\zeta (\varphi \varepsilon - c)$
H_2O	$\zeta 2\varphi (1 - \varepsilon + \frac{z\varepsilon}{2})$	$2(1 - \varphi \varepsilon) + z\varepsilon \varphi + c$
CO	0	ζc
H_2	0	$\zeta (2(\varphi - 1) - c)$
O_2	$1 - \zeta \varphi$	$1 - \zeta$
N_2	$\psi + \zeta \varphi \varepsilon \frac{w}{2}$	$\psi + \zeta \varphi \varepsilon \frac{w}{2}$
combustível	$(1 - \zeta) \frac{\varepsilon \varphi}{cx}$	$(1 - \zeta) \frac{\varepsilon \varphi}{cx}$
total	$\varphi \zeta (1 + \varepsilon(z - 1 - \frac{1}{cx} + \frac{w}{2})) + \frac{\varepsilon \varphi}{cx} + 1 + \psi$	$\varphi \zeta (1 + \varepsilon(z - 1 - \frac{1}{cx} + \frac{w}{2})) + \frac{\varepsilon \varphi}{cx} + 1 + \psi + \zeta (\varphi - 1)$

nas equações 33 e 35:

$$\varepsilon \varphi \left(mol_C + \frac{y}{2} mol_{H_2} + \frac{z}{2} mol_{O_2} + \frac{w}{2} mol_{N_2} \right) + (mol_{O_2} + \psi mol_{N_2}) = \quad (42)$$

$$\varepsilon \varphi \left(12 + \frac{y}{2} 2 + \frac{z}{2} 32 + \frac{w}{2} 28 \right) + (32 + \psi 28)$$

E então os gases queimados terão uma massa molecular média definida por:

$$MW_b = \frac{\varepsilon \varphi (12 + y + 16z + 14w) + (32 + \psi 28)}{n_{q_{total}}} \quad (43)$$

Sendo que $n_{q_{total}}$ representa a quantia total de compostos queimados, oriunda das tabelas 1 ou 2. Para uma nova carga dentro do sistema, a massa molecular média também pode ser calculada, e terá valor determinado por:

$$MW_u = \frac{\varepsilon \varphi (12 + y + 16z + 14w) + (32 + \psi 28)}{n_{c_{total}}} \quad (44)$$

Onde $n_{c_{total}}$ agora quantifica a composição da mistura ar+combustível, sendo retirado da tabela 3. Ambos MW_b e MW_u possuem a unidade gmol pela própria definição de y, z, w, e os outros parâmetros utilizados para se encontrar estes (BRUNETTI, 2012). Com estes valores, o cálculo da densidade específica dos reagentes e produtos pode ser facilmente deduzido utilizando como modelo a equação de gases ideais, isto é:

$$\rho = \frac{pMW}{RT} \quad (45)$$

Para se definir as propriedades termodinâmicas de entalpia e calores específicos, é necessário conhecer as frações molares de cada composto presente nas reações. Portanto, define-se a quantidade X_i por:

$$X_i = \frac{n_i}{n_{total}} \quad (46)$$

De forma que n_i pode ser retirado das tabelas de número de moles da espécie i para cada mol de O_2 no ar (BRUNETTI, 2012). Tendo X_i para todas as substâncias, calcula-se a entalpia h dos reagentes ou produtos por meio de uma média ponderada.

$$h = \sum h_i X_i \quad (47)$$

Para h_i representando a entalpia específica do i -ésimo componente. Estas entalpias específicas podem ser encontradas pelas tabelas deduzidas por (WYLEN et al., 1969), também disponível em outros livros, que fornecem polinômios de acordo com a faixa de temperatura em que a substância se encaixa. (BRUNETTI, 2012) desenvolve estas tabelas de entalpias específicas, com base nas tabelas de (WYLEN et al., 1969), para os produtos das combustões desenvolvidas no presente texto.

Para demonstrar a diferença ao utilizar o modelo de ciclo Otto a ar-combustível ou utilizar o ciclo Otto padrão a ar, duas simulações foram realizadas em (BRUNETTI, 2012) e sobrepostas, uma para ar puro e outra para uma mistura de ar-isooctano, com $\phi = 1$, para os seguintes parâmetros: razão de compressão 8:1, pressão inicial de 1 bar, temperatura inicial de 300 K e deslocamento unitário de 0,5 L. Com as condições iniciais e com auxílio de rotinas computacionais, a solução do ciclo se inicia pelo processo de compressão, a partir da equação de processos isentrópicos $p \cdot V^k = cte$, gerando a curva a seguir.

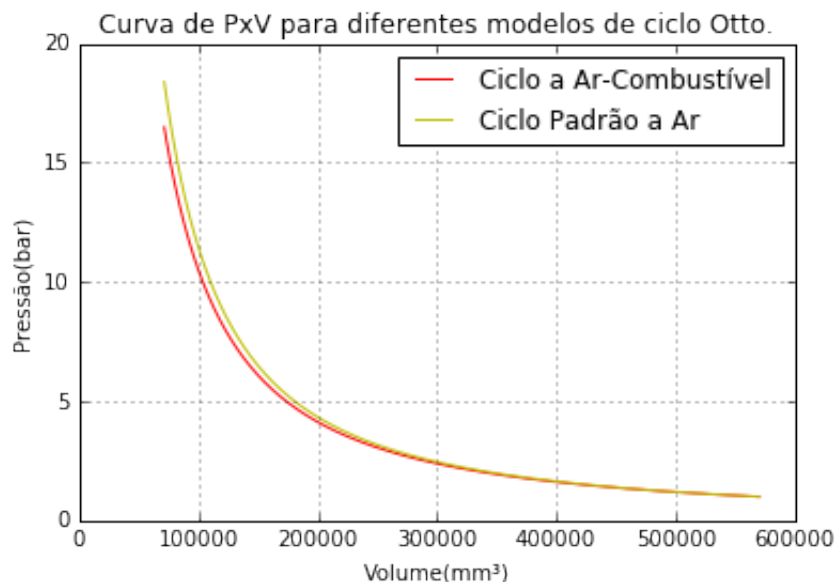


Figura 6: Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, para o tempo de compressão.

Observa-se uma diferença de aproximadamente 2 bar ao final da compressão, sendo a

curva de pressão do ciclo ar-isooctano a mais baixa durante toda a redução do volume. Com a pressão, temperatura, k , C_p e C_v encontrados ao final da compressão, o processo de adição de calor se inicia. Este processo ocorre, tanto no ciclo padrão a ar quanto no ciclo ar-combustível, a volume constante. Para as reações químicas descritas para esta mistura estequiométrica, admite-se uma adição de 2000 kJ/kg de calor em ambos sistemas, gerando as próximas curvas de pressão.

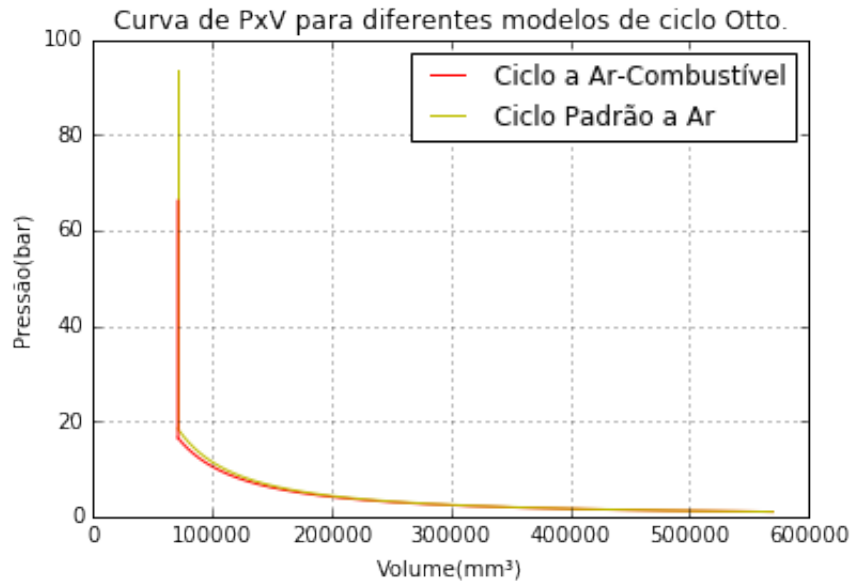


Figura 7: Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, após o tempo de adição de calor.

Com a diferença de pressão entre ciclos ainda maior ao final desta etapa, verifica-se uma pressão maior para o ciclo de ar puro. Para se encontrar a temperatura ao final deste processo, utiliza-se a relação:

$$Q = m \cdot C_v \cdot \Delta T \quad (48)$$

Que pode ser obtida a partir da equação 11, permitindo então a criação da próxima curva de pressão, para o tempo de expansão. Utilizando novamente a equação de processo isentrópico, $p \cdot V^k = cte$, a nova curva é obtida conforme figura 8 a seguir.

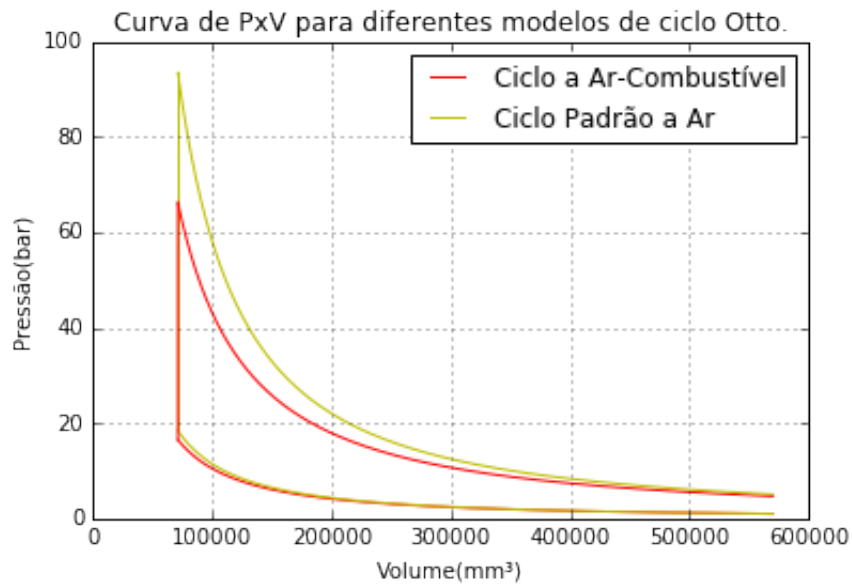


Figura 8: Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, após o tempo de expansão.

Novamente a curva para o ciclo padrão a ar possui valores de pressão maiores do que os para o ciclo a ar-isooctano, resultando em um trabalho positivo maior para o ar puro como fluido de trabalho. Por fim, sabendo que a retirada de calor é considerada como um processo isocórico em ambos os ciclos, e a temperatura final deste processo deve ser igual a temperatura inicial do ciclo, a equação 48 pode ser utilizada para se encontrar a quantidade de calor que deve ser retirada para se concluir os ciclos, formando a figura 9.

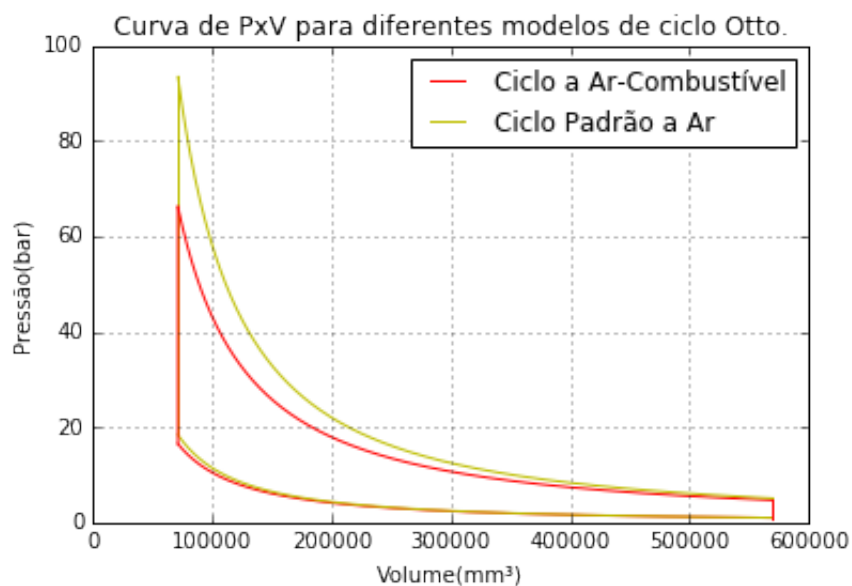


Figura 9: Curvas de pressão no cilindro sobrepostas para os modelos de ciclos padrão de ar e ar-isooctano, após o tempo de retirada de calor.

Com os ciclos concluídos, sabendo que o ciclo de maior área é o ciclo padrão a ar, os resultados finais encontrados foram de: um trabalho realizado de 1126 kJ/kg para o ciclo padrão a ar, levando a uma eficiência térmica de 56,3%, e um trabalho realizado de 930 kJ/kg para o ciclo a ar-isooctano, levando a uma eficiência de 46,5%, confirmando a ideia de que a solução de ciclos Otto pelo modelo Ar-Combustível apresenta valores mais próximos de valores reais (BRUNETTI, 2012).

O processo de combustão de produtos é classificado, quanto a variação de entalpia, como sendo um processo exotérmico, em que há liberação de energia conforme os reagentes se tornam produtos, resultando em um valor negativo de Δh (KOTZ, 2009). Se considerar-se a formação de 1 mol de determinado produto a partir de seus componentes básicos, tem-se uma variação de entalpia chamada Entalpia padrão de formação molar, Δh_f° , cujo valor já foi determinado experimentalmente para diversos combustíveis e gases utilizados no desenvolvimento descrito, como os gases de dióxido de carbono, de vapor de água, de gás nitrogênio, etc. Utilizando a denominada Lei de Hess, que define que as entalpias de formação de determinado composto independe das fases intermediárias, é possível obter o calor liberado pela reação de combustão, com auxílio das tabelas de Δh_f° em conjunto com a quantidade molar de produtos calculada.

2.2.5 DISCUSSÃO

Com estes modelos expostos em 2.2.2, 2.2.3 e 2.2.4 a possibilidade da elaboração de um novo modelo que visa utilizar as vantagens que cada um deles oferece, minimizando as desvantagens, é evidente, visto que apesar do diferente equacionamento, os modelos não nulificam uns aos outros, isto é, podem coexistir como um único modelo para que os parâmetros de operação do motor sejam relevantes, e os processos sejam irreversíveis. O maior desafio será desenvolver uma metodologia que permita a utilização de diferentes combustíveis para a mistura, já que um modelo que cobre apenas os combustíveis tabelados em (BRUNETTI, 2012) estará muito limitado para ser aplicável em simulações.

2.3 MISTURAS E SUAS PROPRIEDADES

Para trabalhar com misturas de gases não reativos, ou gases de combustão neste caso, primeiramente é necessário conhecer quais gases estão presentes e qual a composição da mistura, isto é, a fração molar ou mássica de cada componente (CENGEL; BOLES, 2002). Considerando l gases misturados, pode-se denominar a massa da mistura, m_m , e o número de mols,

n_m , destes como sendo:

$$m_m = \sum_{i=1}^l m_i \quad (49a)$$

$$n_m = \sum_{i=1}^l n_i \quad (49b)$$

A fração mássica, $m_{f,i}$, e a fração molar, X_i , da i -ésima substância sendo estudada, é determinada então a partir da massa individual pelo total de massa ou do número de mols pelo total de mols, como na equação 46 (CENGEL; BOLES, 2002).

$$m_{f,i} = \frac{m_i}{m_m} \quad (50)$$

$$X_i = \frac{n_i}{n_m}$$

Em posse da fração molar, é possível determinar ainda a massa molar da mistura, M_m , sabendo que a massa de certa substância é descrita por $m = nM$, assim como a constante de gás da mistura, R_m , a partir desta primeira e da constante universal dos gases (CENGEL; BOLES, 2002).

$$M_m = \frac{m_m}{n_m} = \frac{\sum m_i}{n_m} = \frac{\sum n_i M_i}{n_m} = \sum_{i=1}^l X_i M_i \quad (51a)$$

$$R_m = \frac{R_u}{M_m} \quad (51b)$$

Com estas relações, é possível ainda se relacionar as frações mássicas e molares caso necessário:

$$m_{f,i} = \frac{m_i}{m_m} = \frac{n_i M_i}{n_m M_m} = X_i \frac{M_i}{M_m} \quad (52)$$

Os gases ideais apresentam um comportamento $P - v - T$ descrito pela equação simples de estado $Pv = RT$, e suas misturas também são consideradas gases ideais, visto que, por definição, em certo gás ideal as moléculas não interferem umas nas outras, e, portanto, em suas misturas estas continuam não interferindo uma nas outras. Para se determinar a equação de comportamento $P - v - T$ destas misturas, utiliza-se os modelos de Dalton e de Amagat, que descrevem a pressão de uma mistura de gases como sendo igual a soma das pressões que cada gás exerceria se existisse sozinho a temperatura e volume da mistura, e o volume da mistura de gases como sendo igual a soma dos volumes que cada gás ocuparia se existisse sozinho a temperatura e pressão da mistura, respectivamente (CENGEL; BOLES, 2002). Então, considerando que a temperatura T_m é uniforme em toda a mistura e igual a temperatura de cada componente,

estas leis possuem a seguinte forma:

$$\text{Lei de Dalton} \quad P_m = \sum_{i=1}^l P_i(T_m, V_m) \quad (53)$$

$$\text{Lei de Amagat} \quad V_m = \sum_{i=1}^l V_i(T_m, P_m) \quad (54)$$

Onde P_i e V_i são comumente chamados de pressão componente e volume componente, e podem ser relacionados à fração molar do gás da seguinte maneira:

$$\frac{P_i}{P_m} = \frac{n_i R_u T_m / V_m}{n_m R_u T_m / V_m} = \frac{n_i}{n_m} = X_i$$

$$\frac{V_i}{V_m} = \frac{n_i R_u T_m / P_m}{n_m R_u T_m / P_m} = \frac{n_i}{n_m} = X_i$$

Logo, a fração de pressão e a fração de volume são:

$$\frac{P_i}{P_m} = \frac{V_i}{V_m} = \frac{n_i}{n_m} = X_i \quad (55)$$

Para se determinar as propriedades extensivas da mistura, basta utilizar a mesma ideia do cálculo da massa da mistura, onde a propriedade de cada gás envolvido é simplesmente somada. Sendo assim, a energia interna, a entalpia e a entropia da mistura podem ser descritas por:

$$U_m = \sum U_i = \sum m_i u_i = \sum n_i \bar{u}_i \quad (kJ) \quad (56a)$$

$$H_m = \sum H_i = \sum m_i h_i = \sum n_i \bar{h}_i \quad (kJ) \quad (56b)$$

$$S_m = \sum S_i = \sum m_i s_i = \sum n_i \bar{s}_i \quad (kJ) \quad (56c)$$

E, a partir destas, pode-se encontrar as variações de energia interna, entalpia e entropia simplesmente utilizando as variações no lugar dos valores instantâneos. Para obter as propriedades intensivas da mistura, basta dividir as equações acima pela massa ou pela quantidade de mols, dependendo de qual base seja preferível (CENGEL; BOLES, 2002).

$$u_m = \sum m_{f_i} u_i \quad (kJ/kg) \quad \text{ou} \quad \bar{u}_m = \sum X_i \bar{u}_i \quad (kJ/kmol) \quad (57a)$$

$$h_m = \sum m_{f_i} h_i \quad (kJ/kg) \quad \text{ou} \quad \bar{h}_m = \sum X_i \bar{h}_i \quad (kJ/kmol) \quad (57b)$$

$$s_m = \sum m_{f_i} s_i \quad (kJ/kg \cdot K) \quad \text{ou} \quad \bar{s}_m = \sum X_i \bar{s}_i \quad (kJ/kmol \cdot K) \quad (57c)$$

Consequentemente, os calores específicos da mistura, $c_{p,m}$ e $c_{v,m}$, são matematicamente descritos como a soma dos calores específicos individuais pela fração mássica ou molar do i -ésimo gás.

$$c_{v,m} = \sum m_{f_i} c_{v,i} \text{ (kJ/kg} \cdot \text{K)} \quad \text{ou} \quad \bar{c}_{v,m} = \sum X_i \bar{c}_{v,i} \text{ (kJ/kmol} \cdot \text{K)} \quad (58a)$$

$$c_{p,m} = \sum m_{f_i} c_{p,i} \text{ (kJ/kg} \cdot \text{K)} \quad \text{ou} \quad \bar{c}_{p,m} = \sum X_i \bar{c}_{p,i} \text{ (kJ/kmol} \cdot \text{K)} \quad (58b)$$

Para os gases de combustão estudados no modelo desenvolvido no presente trabalho, utiliza-se uma aproximação para gases ideais, considerando que todos os valores $c_{v,i}$ e $c_{p,i}$ são constantes. Todavia, isto não implica que os calores específicos da mistura são constantes, visto que a composição da mistura irá se alterar durante a combustão da mistura de ar e combustível (CENGEL; BOLES, 2002).

3 METODOLOGIA

Primeiramente, uma modelagem termodinâmica de um ciclo Otto a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor será realizada, de modo que toda a modelagem matemática seja notoriamente bem desenvolvida e exposta, assegurando a existência e a unicidade da solução dos problemas. Portanto, o modelo final terá reação de combustão não-isocórica, processos não reversíveis e independência do combustível quanto ao carbono, evitando a limitação deste a tabelas de combustíveis.

Com o modelo elaborado, será necessária uma transcrição deste em um sumário do modelo para que futuras implementações possam ocorrer em diferentes linguagens de programação. Com o sumário concluído, a implementação deste em linguagem Python será realizada com auxílio da plataforma denominada Jupyter Notebook, que auxilia a criação, organização e simulação de programas em python, tornando possíveis testes e validações.

A etapa seguinte consiste de validar este novo modelo de ciclo Otto a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor utilizando os resultados discutidos em 2.2.2, 2.2.3 e 2.2.4. Os resultados possivelmente apresentarão pequenas diferenças aos outros modelos, sendo apresentados por curvas de pressão por volume.

Com o modelo autenticado, alguns resultados serão obtidos pela simulação do modelo em um computador pessoal, visando uma análise que permita expor todas as vantagens que este novo modelo apresenta com relação aos outros, e também indicar quais possíveis melhoras os futuros modelos podem buscar para melhorar a precisão da simulação. Por fim, os resultados serão pós-processados no ambiente de programação Jupyter Notebook.

4 MODELO DE CICLO OTTO A AR-COMBUSTÍVEL COM TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE CALOR

Para a modelagem das características físicas e cinemáticas deste modelo, utiliza-se as mesmas equações dispostas na seção 2.1, isto é, as equações de 1 a 8 são utilizadas para descrever o comportamento da posição instantânea do pistão e do volume instantâneo do cilindro, com mesmas notações. O ângulo de ignição permanece como θ , e a duração da combustão permanece como δ , de modo que a equação 19 é utilizada para se encontrar esta, e a combustão ocorre no intervalo $\theta \leq \alpha \leq \theta + \delta$.

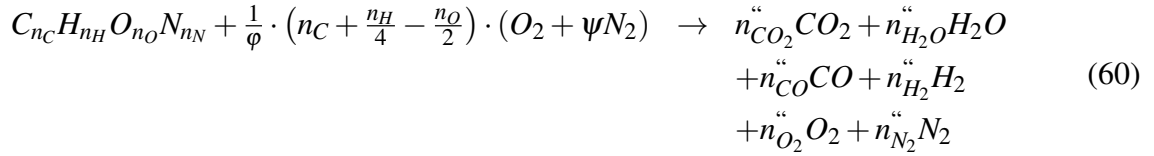
A função $y(\alpha)$ é redefinida como a fração acumulada de reação, onde $y = 0$ indica que não houve combustão alguma no sistema, e, portanto, não houve liberação de calor algum, e $y = 1$ indica que toda a combustão já ocorreu, liberando todo o calor disponível de ser gerado pelo sistema; e possui comportamento similar ao descrito pelas equações 20 e 25. O calor gerado pela combustão que entra no sistema é dado por:

$$Q(\alpha) = Q_{ent}y(\alpha) \quad (59)$$

Onde $Q(\alpha)$ é o calor acumulado inserido no sistema até o ponto α e Q_{ent} é a quantidade de calor total que é gerada pela combustão. Esta equação se trata de uma forma extensiva da equação 21, e será utilizada neste modelo para solucionar o problema de obtenção da energia interna do estado desconhecido pós processo politrópico. Uma estimativa comumente utilizada para se determinar Q_{ent} é assumir que este é o poder calorífico inferior (PCI) do combustível, de forma que $Q_{ent} = m_{combustivel} \cdot PCI$. Todavia, este tipo de aproximação só é válida no caso de uma proporção perfeitamente estequiométrica de combustível e ar no sistema, e, portanto, não é recomendada. Logo, o cálculo do calor neste modelo será realizado a partir das chamadas entalpias de formação dos reagentes e produtos das reações químicas de combustão, descritas a seguir.

Para uma forma genérica da molécula de combustível, tem-se a notação $C_{n_C}H_{n_H}O_{n_O}N_{n_N}$, onde n_C , n_H , n_O e n_N representam a quantidade de átomos de cada substância presente em uma molécula de combustível. A equação para combustão de 1 mol deste combustível genérico pode

ser escrita da seguinte forma:



Onde $n_i^{''}$ representa o número de moles da espécie i produzidos na queima de 1 mol de $C_{n_C}H_{n_H}O_{n_O}N_{n_N}$ para a razão de equivalência combustível-ar de φ , descrita pela equação 34. A constante ψ define a proporção entre as frações de gás nitrogênio e de gás oxigênio presente na atmosfera a nível molecular. Neste modelo se considera que o ar é composto 79% de N_2 e 21% de O_2 , e, portanto, novamente tem-se que $\psi = 79/21 \cong 3,76$. Define-se ainda que:

$$\varepsilon = \frac{1}{n_C + \frac{n_H}{4} - \frac{n_O}{2}} \quad (61)$$

Que é o inverso da quantidade estequiométrica de oxigênio para queimar o 1 mol de $C_{n_C}H_{n_H}O_{n_O}N_{n_N}$. Todavia, este tipo de aproximação normalizada pode gerar problemas ao tentar adaptar o modelo para condições de operação sem combustível algum, o que será necessário para a validação deste. Portanto, neste modelo será utilizada a equação para a combustão mais genérica o possível, sem normalização alguma, introduzindo dois novos parâmetros: n_F como sendo a quantia em mols de combustível que entra no sistema, e n_{ar} como sendo a quantia em mols de ar que adentra junto ao combustível. Estes podem ser encontrados pela razão de equivalência combustível-ar φ , calculada pela definição:

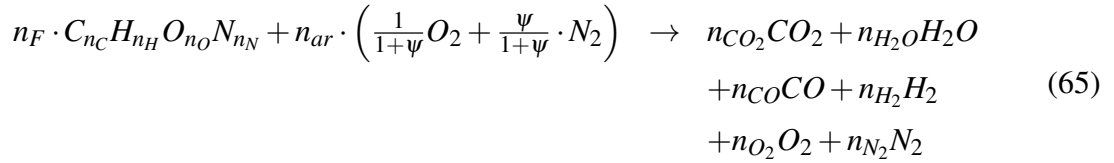
$$\varphi = \frac{\text{razão combustível} - ar_{real}}{\text{razão combustível} - ar_{estequiométrica}} = \frac{n_F/n_{ar}}{1/((1 + \psi)/\varepsilon)} \quad (62)$$

A partir das condições de entrada (P_0, T_0) que são fornecidas é possível encontrar a quantidade total de mols de uma mistura fresca (n_m), sem gases de combustão, pela equação de estado, que também é a soma de n_F e n_{ar} . Com este valor de quantidade de mols, e com a relação 62, pode-se encontrar n_{ar} e, conseqüentemente, n_F .

$$n_{ar} = \frac{P_0 V_0}{\bar{R} T_0} \left(1 + \frac{\varphi \varepsilon}{1 + \psi} \right)^{-1} \quad (63)$$

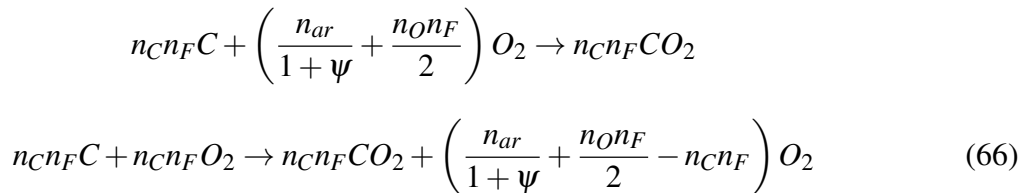
$$n_F = \frac{\varphi \varepsilon}{1 + \psi} n_{ar} \quad (64)$$

Desta forma, a equação de reação da combustão é dada passa a ser:

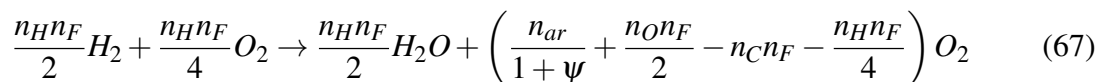
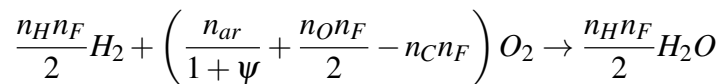


Onde n_i é a quantidade da substância i no sistema após a combustão. Para se encontrar n_i , admite-se duas possíveis condições ou classificações para φ . Quando tem-se as misturas ricas, considera-se que $\varphi \leq 1$, e há oxigênio suficiente ou em excesso para a combustão completa do combustível, gerando apenas CO_2 , H_2O , N_2 e, talvez, O_2 como produtos de combustão. Para misturas pobres, considera-se que $\varphi > 1$, e não há oxigênio suficiente para a queima completa, o que leva a formação de CO e H_2 nos produtos da combustão.

Então para as misturas ricas, utiliza-se basicamente as reações $1C + 1O_2 \rightarrow 1CO_2$ e $2H_2 + 1O_2 \rightarrow 2H_2O$, considerando-se que as quantidades de CO e H_2 nos produtos devem ser desprezíveis, e, portanto, todo o carbono disponível deve ser utilizado na primeira destas reações, e todo o hidrogênio disponível é utilizado na segunda reação. Sabendo que a quantidade de oxigênio nos reagentes pela equação 65 é de $\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2}$, e a quantidade de hidrogênio é de $\frac{n_{HNF}}{2}$, tem-se as reações:



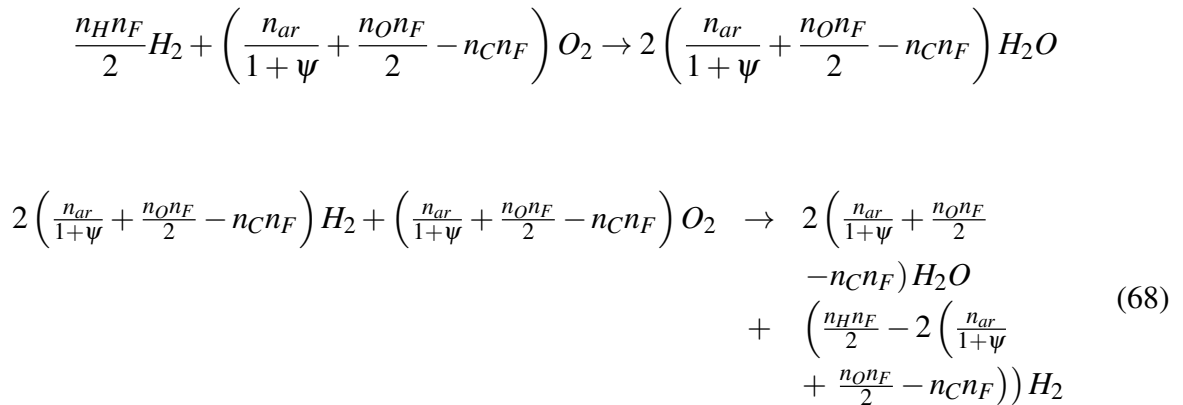
Com esta quantidade $\left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF} \right)$ de oxigênio que sobra no sistema, realiza-se a próxima reação.



Sendo assim, as quantidades n_i neste caso são de $n_{CO_2} = n_{CNF}$, $n_{H_2O} = \frac{n_{HNF}}{2}$, $n_{O_2} = \left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF} - \frac{n_{HNF}}{4} \right)$ e $n_{N_2} = \frac{n_{ar}\psi}{1+\psi} + \frac{n_{NNF}}{2}$, em mols.

Para misturas pobres, utiliza-se a mais a reação $1CO_2 + 1H_2 \rightleftharpoons 1CO + 1H_2O$, considerando-se que uma quantia c de CO é formada, fazendo-se necessária a utilização da constante

de equilíbrio definida pela relação 39. Como em reações de combustão em MCI é possível admitir um valor aproximadamente fixo para esta constante, neste modelo o valor de 3,5 é utilizado, eliminando a dependência da temperatura desta relação. Então, aplicando-se a quantia $\left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF}\right)$ de oxigênio na reação de formação da água, considerando que todo o oxigênio deve ser gasto, e, portanto, haverá uma sobra de hidrogênio, faz-se o equilíbrio:



Logo, as quantias n_i para $\varphi > 1$ são de $n_{CO_2} = n_{CNF} - c$, $n_{H_2O} = 2 \left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF}\right) + c$, $n_{CO} = c$, $n_{H_2} = \left(\frac{n_H n_F}{2} - 2 \left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF}\right)\right) - c$ e $n_{N_2} = \frac{n_{ar} \psi}{1+\psi} + \frac{n_{NNF}}{2}$. Substituindo estes valores na equação 39, e resolvendo-se para c , tem-se:

$$\begin{aligned} (K-1)c^2 + \left\{ 2 \left(n_{CNF} - \frac{n_{ar}}{1+\psi} \right) + K \left[\frac{2n_{ar}}{1+\psi} - \left(3n_C + \frac{n_H}{2} - n_O \right) n_F \right] - n_{ONF} \right\} c \\ + K n_{CNF} \left(2n_{CNF} + \frac{n_H n_F}{2} - n_{ONF} - \frac{2n_{ar}}{1+\psi} \right) = 0 \end{aligned} \quad (69)$$

Que pode ser resolvida por uma simples fórmula de Bhaskara. A tabela a seguir resume todas os valores de n_i para as duas condições de φ .

Tabela 4: Quantidades de mols para misturas ricas e pobres.

n_i	$\varphi \leq 1$	$\varphi > 1$
n_{CO_2}	n_{CNF}	$n_{CNF} - c$
n_{H_2O}	$\frac{n_H n_F}{2}$	$2 \left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF} \right) + c$
n_{CO}	0	c
n_{H_2}	0	$\left(\frac{n_H n_F}{2} - 2 \left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF} \right) \right) - c$
n_{O_2}	$\left(\frac{n_{ar}}{1+\psi} + \frac{n_{ONF}}{2} - n_{CNF} - \frac{n_H n_F}{4} \right)$	0
N_2	$\frac{n_{ar} \psi}{1+\psi} + \frac{n_{NNF}}{2}$	$\frac{n_{ar} \psi}{1+\psi} + \frac{n_{NNF}}{2}$

A partir do primeiro ciclo, uma fração de gases queimados, ou residuais, permanece no cilindro devido à existência do volume V_2 , já que o cilindro nunca chega a um volume

instantâneo nulo. Sendo ζ (zeta) essa fração de gases queimados, os dados de desenvolvimentos experimentais anteriores expostos em (HEYWOOD, 1988) foram utilizados neste trabalho para desenvolver uma equação para este valor.

Utilizando o estudo de fração de gases queimados em função da pressão de escape do fluido de trabalho, em *mmHg* primeiramente, que é a unidade em que (HEYWOOD, 1988) fornece os dados, para diferentes razões de compressão do pistão, a função foi desenvolvida primeiramente considerando fixas estas razões de compressão, e aplicando o chamado método Qui-quadrado de modelagem de dados. Criou-se diferentes funções para a razão de 8,5 e para a razão de 10,5. Com a diferença entre as curvas, e estas curvas devidamente testadas para verificar possíveis variações, iniciou-se um processo de tentativa de erro de relações entre as curvas de frações de gases e as razões de compressão, sabendo que esta relação tende a ser aparentemente exponencial. O resultado final destes testes, retornou uma função de forma $\zeta = \zeta(P, r_v)$, retornando o valor em %.

$$\begin{aligned} \zeta(P, r_v) = & 17,807 + 6,423 \cdot g(r_v) \\ & - (0,029 + 0,013 \cdot g(r_v)) \cdot P \\ & + (1,828 + 0,798 \cdot g(r_v)) \times 10^{-5} \cdot P^2 \end{aligned} \quad (70)$$

$$\text{com } g(r_v) = (5,25 - 0,5 \cdot r_v) \cdot e^{(8,5 - r_v)}.$$

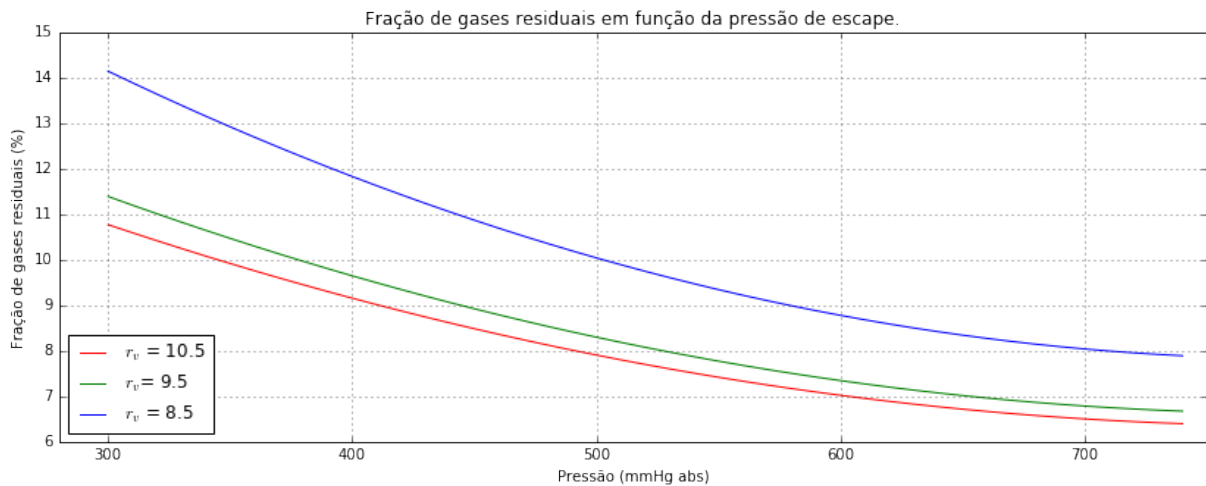


Figura 10: Curvas de ζ por P obtidas para diferentes valores de r_v a partir da equação 70 obtida por Qui-quadrado.

Convertendo a fórmula para as unidades internacionais, isto é, para se utilizar a pressão

em kPa , tem-se a equação:

$$\begin{aligned} \zeta(P, r_v) = & 17,807 + 6,423 \cdot g(r_v) \\ & - (0,217 + 0,094 \cdot g(r_v)) \cdot P \\ & + (1,028 + 0,449 \cdot g(r_v)) \times 10^{-3} \cdot P^2 \end{aligned} \quad (71)$$

$$\text{com } g(r_v) = (5,25 - 0,5 \cdot r_v) \cdot e^{(8,5 - r_v)}.$$

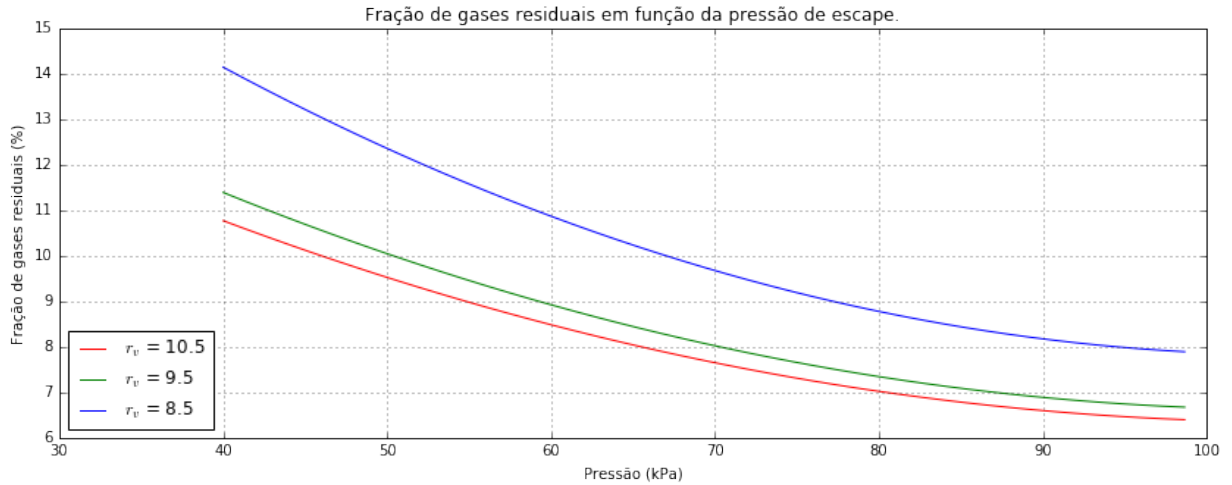


Figura 11: Curvas de ζ por P obtidas para diferentes valores de r_v a partir da equação 71 obtida por Qui-quadrado.

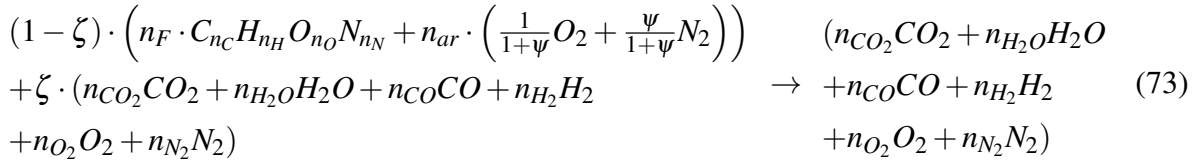
Um breve teste feito para uma pressão de $750,0 \text{ mmHg}$, assumindo que esta é a mais próxima da pressão atmosférica real, e uma razão de compressão de $8,5$ na primeira equação para ζ , apresentou mesmo resultado que um teste feito para uma pressão de $99,992 \text{ kPa}$, que é uma conversão aproximada de $750,0 \text{ mmHg}$ para kPa , e razão de compressão de $8,5$ nesta segunda equação. Isto é, $\zeta_{mmHg}(750,0, 8,5) = \zeta_{kPa}(99,992, 8,5) = 7.86701\%$, validando a conversão de unidades.

Feito isto, a composição da mistura fresca passa a ser:

$$\begin{aligned} \chi(\zeta) = & (1 - \zeta) \cdot \left(n_F \cdot C_{nC} H_{nH} O_{nO} N_{nN} + n_{ar} \cdot \left(\frac{1}{1+\psi} O_2 + \frac{\psi}{1+\psi} N_2 \right) \right) \\ & + \zeta \cdot (n_{CO_2} CO_2 + n_{H_2O} H_2O + n_{CO} CO + n_{H_2} H_2 + n_{O_2} O_2 + n_{N_2} N_2) \end{aligned} \quad (72)$$

Note que, como não se insere mais n_F mols de combustível no sistema, mas sim $(1 - \zeta) n_F$ mols, não há necessidade de recalculer a quantia de produtos ou algo assim. Então,

a reação de combustão do sistema pode ser reescrita da seguinte maneira:



A forma mais completa da composição da mistura utilizada neste modelo vem da composição da mistura exposta na equação 73 acima, e da definição da função $y(\alpha)$, que irá definir quanto dos reagentes já se tornaram produtos ou não. Sabendo que enquanto $y = 0$ a composição da mistura é inteiramente de reagentes, e que a partir de $y = 1$ a composição é inteiramente de produtos, pode-se escrever a composição dos estados intermediários da combustão da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 \chi(y, \zeta) &= (1 - \zeta) \cdot [(1 - y) \cdot \left(n_F \cdot C_{n_C} H_{n_H} O_{n_O} N_{n_N} + n_{ar} \cdot \left(\frac{1}{1+\psi} O_2 + \frac{\psi}{1+\psi} N_2 \right) \right) \\
 &+ y \cdot (n_{CO_2} CO_2 + n_{H_2O} H_2O + n_{CO} CO + n_{H_2} H_2 + n_{O_2} O_2 + n_{N_2} N_2)] \\
 &+ \zeta \cdot (n_{CO_2} CO_2 + n_{H_2O} H_2O + n_{CO} CO + n_{H_2} H_2 + n_{O_2} O_2 + n_{N_2} N_2) \\
 &\quad \rightarrow \\
 \chi(y, \zeta) &= (1 - y)(1 - \zeta) \cdot \left(n_F \cdot C_{n_C} H_{n_H} O_{n_O} N_{n_N} + n_{ar} \cdot \left(\frac{1}{1+\psi} O_2 + \frac{\psi}{1+\psi} N_2 \right) \right) \\
 &+ [\zeta + (1 - \zeta)y] \cdot (n_{CO_2} CO_2 + n_{H_2O} H_2O + n_{CO} CO + n_{H_2} H_2 \\
 &\quad + n_{O_2} O_2 + n_{N_2} N_2)
 \end{aligned} \quad (74)$$

Sabendo as quantidades e a composição instantânea da mistura, pode-se elaborar um modelo termodinâmico para esta mistura, de modo a habilitar soluções analíticas relativamente simples deste modelo de ciclo Otto. Dito isto, considera-se que estes gases da mistura possuem comportamento similar ao dos gases ideais, e, portanto, possuem $\bar{c}_{v,i}$ constante, de modo que as propriedades da mistura, como energia interna e pressão, de índice m , com relação as propriedades parciais de cada substância, de índice i , possam ser tratados conforme descrito no tópico 2.3 pelas equações 55 e 56a, isto é:

$$\frac{P_i}{P_m} = \frac{V_i}{V_m} = X_i$$

E:

$$U_m = \sum_i m_i u_i = \sum_i n_i \bar{u}_i$$

Já a temperatura parcial de cada componente possui o seguinte comportamento:

$$T_i = T_m \quad \forall i \quad (75)$$

Pela definição de que $\bar{u}_i = \bar{c}_{v,i} T_m$ para gases ideais, a partir destas equações 56a e 75,

tem-se:

$$U_m = \sum_i n_i \bar{c}_{v,i} T_m \quad (76)$$

$$T_m = \frac{U_m}{C_{v,m}} \quad \text{onde } C_{v,m} = \sum_i n_i \bar{c}_{v,i} \quad (77)$$

Como $C_{v,m}$ é a capacidade térmica a volume constante da mistura, esta não é constante, visto que apenas os gases individuais possuem calor específico constante e que a composição da mistura se altera conforme a combustão ocorre. Tendo definido como se encontrar a energia interna do sistema e sua temperatura, necessita-se encontrar o calor que adentra no ciclo e o trabalho realizado sobre ou pelo sistema.

Discretizando os processos de compressão, combustão e expansão por conjuntos de processos politrópicos, durante o j -ésimo processo o sistema irá de um estado j conhecido para um estado $j + 1$ indeterminado, obedecendo a equação $PV_j^{n_j} = C_j$ para processos politrópicos. Então Q_j é o total de calor que entra no sistema durante o j -ésimo processo, de forma que $Q_j > 0$ indica um calor adentrando no sistema, e $Q_j = 0$ indica que se trata de um dos processos adiabáticos (compressão ou expansão). Assumindo que W_j seja o trabalho realizado no j -ésimo processo, de modo que este é negativo caso esteja sendo executado pelo sistema, e positivo se é executado sobre este, então a primeira lei da termodinâmica é reescrita da forma:

$$Q_j + W_j = \Delta U_j = U_{j+1} - U_j \quad (78)$$

Onde U_j é calculado pela equação 76 a partir de $j = 0$ para o estado inicial. Como Q_j é o calor apenas para o j -ésimo processo, pode-se utilizar a composição instantânea da mistura no ponto y_j e y_{j+1} para se encontrar este valor, isto é, a reação química do j -ésimo processo politrópico pode ser descrita como:

$$\chi(y_j, \zeta) \rightarrow \chi(y_{j+1}, \zeta) \quad (79)$$

Com $\chi(y_j, \zeta)$ encontrado pela equação 74. A chamada entalpia de formação é entendida como a energia liberada ou absorvida quando um mol de certo composto é formado no estado padrão (25°C e 100kPa), e possui símbolo h_f^0 para base mássica, e \bar{h}_f^0 para base molar. Admite-se que substâncias puras e estáveis possuem entalpia de formação nula neste estado, e para se encontrar a energia liberada em certa combustão, chamada comumente de entalpia de combustão, encontra-se a diferença entre as entalpias de formação dos produtos e dos reagentes,

o que significa que:

$$q_{ent} = \sum_{\text{produtos}} h_{f,i}^0 - \sum_{\text{reagentes}} h_{f,i}^0 \quad (80)$$

Todavia, devido ao fato de a entalpia de combustão normalmente ser representada como um valor negativo, já que se trata de uma reação exotérmica, para se encontrar Q_j esta ordem é invertida, passando a ser a diferença entre os reagentes e os produtos. O valor q_{ent} é a entalpia de combustão por unidade de massa. Todavia, neste modelo uma forma extensiva é utilizada para primeira lei. Fazendo-se a diferença entre os reagentes no estado j e os produtos do estado $j+1$, é possível se encontrar a entalpia de combustão, e, conseqüentemente, a quantidade de calor liberada na combustão no j -ésimo processo. Adiciona-se ainda uma quantia Q_{ext} na quantia de calor que adentra no modelo, para o caso de uma fonte externa de calor seja utilizada, para, por exemplo, validação do modelo ao aproximá-lo de um ciclo Otto padrão a ar. Logo, para este modelo:

$$\begin{aligned} Q_j = & \{ (1-y_j)(1-\zeta)n_F \cdot \bar{h}_{f,C_nC_nH_nH_nO_nO_nN_nN}^0 \\ & + [\zeta + (1-\zeta)y_j] \cdot (n_{CO_2}\bar{h}_{f,CO_2}^0 + n_{H_2O}\bar{h}_{f,H_2O}^0 + n_{CO}\bar{h}_{f,CO}^0) \} \\ & - \{ (1-y_{j+1})(1-\zeta)n_F \cdot \bar{h}_{f,C_nC_nH_nH_nO_nO_nN_nN}^0 \\ & + [\zeta + (1-\zeta)y_{j+1}] \cdot (n_{CO_2}\bar{h}_{f,CO_2}^0 + n_{H_2O}\bar{h}_{f,H_2O}^0 + n_{CO}\bar{h}_{f,CO}^0) \} \\ & + Q_{ext}(y_{j+1} - y_j) \end{aligned} \quad (81)$$

Para $y_{j+1} = y(\alpha_{j+1})$ e $y_j = y(\alpha_j)$, lembrando que esta relação só é válida para o intervalo de combustão, para os outros processos se utiliza $Q_j = 0$, e normalmente $Q_{ext} = 0$. O conjunto de valores α_j são chamados de malha angular da manivela. Para se determinar a malha, utiliza-se a relação 24, porém define-se dois valores inteiros N_a e N_c , para representar as quantidades de processos politrópicos para se discretizar os processos adiabáticos/isentrópicos e os processos de combustão, respectivamente. Tendo estes, a malha é dada por:

$$\alpha_j = \begin{cases} -\pi + j\frac{\theta-\pi}{N_a} & \text{para } 0 \leq j < N_a \\ \theta + (j - N_a)\frac{\delta}{N_c} & \text{para } N_a \leq j \leq N_a + N_c \\ \theta + \delta + (j - N_a - N_c)\frac{\pi-\theta-\delta}{N_a} & \text{para } N_a + N_c < j \leq 2N_a + N_c \end{cases} \quad (82)$$

Para o trabalho W_j se utiliza a definição de força por deslocamento para se realizar a integral, em função do volume instantâneo do sistema, e com auxílio da relação $PV^{n_j} = C_j$, de forma que:

$$W_j = \int_{V_j}^{V_{j+1}} PdV = \int_{V_j}^{V_{j+1}} C_j V^{-n_j} dV = \frac{P_j}{1-n_j} \left(V_j - \frac{V_j^{n_j}}{V_{j+1}^{n_j-1}} \right) \quad (83)$$

Inserir esta equação na primeira lei da termodinâmica, equação 78, iria resultar em equações não lineares complexas de se resolver, e, portanto, uma aproximação diferente é tomada. A conjectura 1 exposta em (NAAKTGEBOREN, 2017) é utilizada neste modelo para garantir a unicidade do expoente politrópico n_j do j -ésimo processo, mantendo a variação da energia interna do sistema termodinamicamente consistente com as equações de estado em cada um dos estados j .

Baseando-se nisto, um algoritmo de correção de n_j é utilizado a fim de se encontrar o valor mais correto de n_j . Esta correção ocorre da seguinte forma: escolhe-se um valor inicial qualquer para n_j , como, por exemplo, a constante $k = c_p/c_v = 1 + R_i/c_v$ dos gases, e aplica-se as equações de trabalho, energia interna e calor entre os estados j e $j + 1$, encontrando-se valores de pressão e temperatura quaisquer. Com estes, utiliza-se a relação de processos politrópicos para se encontrar um novo valor de n_j , e repete-se o ciclo, até que a alteração deixe de ser significativa, isto é, até que uma tolerância previamente definida seja cumprida. Portanto, diz-se que:

$$n_j^{k+1} = \frac{\log\left(\frac{P_{j+1}^k}{P_j}\right)}{\log\left(\frac{V_j}{V_{j+1}}\right)} \quad (84)$$

Onde n_j^0 é um chute inicial para o coeficiente politrópico. Com todo o modelo definido, um procedimento de solução, ou um algoritmo, pode ser elaborado para solução deste modelo.

4.1 PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO

Primeiramente, todos parâmetros físicos e cinemáticos do motor em estudo devem ser definidos, assim como o estado inicial $j = 0$, isto é, (T_0, P_0) , e as quantidades de processos N_a e N_c . As quantias de mols n_C , n_H , n_O e n_N também precisam ser inseridas, assim como a entalpia de formação do combustível utilizado e seu calor específico a volume constante. Sendo T_j , P_j e a composição j conhecidas, calcula-se V_j e U_j . Conhecendo os parâmetros físicos do motor, define-se a tolerância ϵ_w para a convergência do *loop* k . Define-se também os valores de $\bar{c}_{v,i}$ para todas as substâncias presentes da mistura e um chute inicial n_j^0 para o coeficiente politrópico.

A partir da equação 74 encontra-se as composições instantâneas da mistura em j e $j + 1$, e encontra-se Q_j a partir da equação 81. Pela malha definida na relação 82, encontra-se o volume V_{j+1} utilizando a equação 8. Como o volume deixa de diminuir e passa a aumentar em determinado ponto do ciclo, pode acontecer de determinado processo j ser isocórico, o que acarretaria em uma divisão por zero na equação 84, e, portanto, uma verificação ocorre nesta

etapa, onde uma tolerância ε_V é definida para caso $|V_j - V_{j+1}| \leq \varepsilon_V$, o sistema irá regredir para um processo isocórico, considerando $W_j = 0$ para resolução da primeira lei da termodinâmica.

Com o coeficiente politrópico, calcula-se o trabalho W_j^k pela equação 83 e, pela primeira lei em sua forma extensiva, equação 78, encontra-se o valor de U_{j+1} . Com esta energia, encontra-se a temperatura do estado $j + 1$ pela equação 77. Com a temperatura e o volume do estado $j + 1$, utiliza-se a equação de estado para se encontrar as pressões parciais de cada substância da composição instantânea deste estado, já que a soma das pressões parciais deve ser igual a pressão total da mistura, isto é:

$$P_{j+1,i} = \frac{n_i \bar{R} T_{j+1}}{V_{j+1}} \quad (85)$$

$$P_{j+1}^k = \sum_i P_{j+1,i} \quad (86)$$

Onde \bar{R} é a constante universal dos gases. Com esta pressão, utiliza-se a equação 84 para se encontrar um novo valor do coeficiente politrópico, e o processo reinicia no cálculo do novo trabalho W_j^{k+1} . O *loop k* se repete até que a tolerância ε_w seja atingida, para só então prosseguir com $j \leftarrow j + 1$, e repetindo-se o *loop* até que o ciclo esteja completo.

4.2 RESUMO DO MODELO

Tabela 5: Sumário do modelo

Parâmetro	Descrição	Equação	Unidade
S	Curso do pistão	-	m
D	Diâmetro do pistão	-	m
L	Comprimento da biela	-	m
r_v	Razão de compressão	$V1/V2$	-
N	Rotação de virabrequim	-	rpm
θ	Ângulo de ignição	-	rad
t_c	Tempo de combustão	-	s
N_a	Quantidade de processos para compressão/expansão	-	-

N_c	Quantidade de processos para combustão	-	-
T_0	Temperatura inicial	-	K
P_0	Pressão inicial	-	kPa
n_C	Quantidade de átomos de carbono na molécula de combustível	-	-
n_H	Quantidade de átomos de hidrogênio na molécula de combustível	-	-
n_O	Quantidade de átomos de oxigênio na molécula de combustível	-	-
n_N	Quantidade de átomos de nitrogênio na molécula de combustível	-	-
$\bar{c}_{v,combustível}$	Calor específico a volume constante do combustível	-	kJ/mol.K
$\bar{h}_{f,combustível}^0$	Entalpia de formação de combustão	-	kJ/mol
φ	Razão de equivalência combustível-ar	-	-
e_W	Tolerância para o loop k	-	kJ
e_V	Tolerância para a diferença de volumes	-	m^3
Constantes			
\bar{R}	Constante universal dos gases	8.3144621×10^{-3}	kJ/mol.k
\bar{c}_{v,CO_2}	Calor específico a volume constante do CO_2	0,02873853	kJ/mol.k

\bar{c}_{v,H_2O}	Calor específico a volume constante do H_2O	0,02540115	kJ/mol.k
$\bar{c}_{v,CO}$	Calor específico a volume constante do CO	0,02083944	kJ/mol.k
\bar{c}_{v,H_2}	Calor específico a volume constante do H_2	0,02033136	kJ/mol.k
\bar{c}_{v,O_2}	Calor específico a volume constante do O_2	0,021183338	kJ/mol.k
\bar{c}_{v,N_2}	Calor específico a volume constante do N_2	0,020869685	kJ/mol.k
$\bar{h}_{f,CO}^0$	Entalpia de formação padrão de CO	-110,53	kJ/mol
\bar{h}_{f,CO_2}^0	Entalpia de formação padrão de CO_2	-393,52	kJ/mol
\bar{h}_{f,H_2O}^0	Entalpia de formação padrão de H_2O (vapor)	-241,82	kJ/mol
Cálculos primários			
$M_{combustivel}$	Massa molar do combustível	$(12n_C + n_H + 16n_O + 14n_N)/1000.0$	kg/mol
V_{du}	Volume descolado unitário	$\frac{\pi D^2}{4} \times S$	m^3
V_2	Volume mínimo	$\frac{V_{du}}{r_v - 1}$	m^3
r	Raio da manivela	$S/2$	m
ω	Velocidade angular	$2\pi N/60$	rad/s
δ	Duração angular da combustão	$\omega \cdot t_c$	rad
α_j	Malha angular	$\begin{cases} -\pi + i \frac{\theta - \pi}{N_s} \\ \theta + (i - N_s) \frac{\delta}{N_q} \\ \theta + \delta + (i - N_s - N_q) \frac{\pi - \theta - \delta}{N_s} \end{cases}$	rad
$y(\alpha_j)$	Fração acumulada de reação química	$\begin{cases} 0 \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi}{\delta}(\alpha - \theta)\right) \\ 1 \end{cases}$	-
$V(\alpha)$	Volume instantâneo	$V_2 + \frac{\pi \cdot D^2}{4} [r(1 - \cos\alpha) + L \left(1 - \sqrt{1 - \frac{r^2}{L^2} \cdot \text{sen}^2\alpha}\right)]$	m^3

ε	Inverso da quantia estequiométrica de ar	$1 / (n_C + \frac{n_H}{4} - \frac{n_O}{2})$	-
n_{ar}	Mols de ar no sistema	$\frac{P_0 V_0}{RT_0} \left(1 + \frac{\varphi \varepsilon}{1 + \psi}\right)^{-1}$	mol
n_F	Mols de combustível no sistema	$\frac{\varphi \varepsilon}{1 + \psi} n_{ar}$	mol
n_i	Quantia de mols da substância i nos produtos	Tabela 4	mol
X_i	Fração molar da substância i	n_i / n_{Total}	-
ζ	Fração de gases residuais	$\zeta(P_{saida}, r_v) = 17,807 + 6,423 \cdot g(r) + (0,217 + 0,094 \cdot g(r)) \cdot P_0 + (1,028 + 0,449 \cdot g(r)) \times 10^{-3} \cdot P_0^2$	-
$g(r)$	Função da razão volumétrica	$g(r) = (5,25 - 0,5 \cdot r) \times e^{(8,5-r)}$	-
Q_j	Calor gerado no processo entre estados j e $j+1$	$\{(1 - y_j)(1 - \zeta)n_F \cdot \bar{h}_{f,C_{n_C}H_{n_H}O_{n_O}N_{n_N}}^0 + [\zeta + (1 - \zeta)y_j] \cdot (n_{CO_2}\bar{h}_{f,CO_2}^0 + n_{H_2O}\bar{h}_{f,H_2O}^0 + n_{CO}\bar{h}_{f,CO}^0)\} - \{(1 - y_{j+1})(1 - \zeta)n_F \cdot \bar{h}_{f,C_{n_C}H_{n_H}O_{n_O}N_{n_N}}^0 + [\zeta + (1 - \zeta)y_{j+1}] \cdot (n_{CO_2}\bar{h}_{f,CO_2}^0 + n_{H_2O}\bar{h}_{f,H_2O}^0 + n_{CO}\bar{h}_{f,CO}^0)\} + Q_{ext}(y_{j+1} - y_j)$	kJ
Loop j e k			
$C_{v,j}$	Capacidade térmica da mistura instantânea	$\sum_i n_i \bar{c}_{v,i}$	kJ/K
$\chi(y_j, \zeta)$	Composição química instantânea	$(1 - y)(1 - \zeta) \cdot (n_F \cdot C_{n_C}H_{n_H}O_{n_O}N_{n_N} + n_{ar} \cdot (\frac{1}{1+\psi}O_2 + \frac{\psi}{1+\psi}N_2)) + [\zeta + (1 - \zeta)y] \cdot (n_{CO_2}CO_2 + n_{H_2O}H_2O + n_{CO}CO + n_{H_2}H_2 + n_{O_2}O_2 + n_{N_2}N_2)$	-
W_j^k	Trabalho no processo entre os estados j e $j+1$	$\frac{P_j}{1-n_j} \left(V_j - \frac{V_j^{n_j}}{V_{j+1}^{n_{j+1}}} \right)$	kJ

U_{j+1}	Energia interna no estado $j + 1$	$U_j + W_j^k + Q_j$	kJ
T_{j+1}	Temperatura no estado $j + 1$	$U_{j+1}/C_{v,j+1}$	K
P_{j+1}	Pressão no estado $j + 1$	$(\sum_i n_i)_{j+1} R_u T_{j+1}/V_{j+1}$	kPa
n_j^{k+1}	Correção do coeficiente politrópico	$\log\left(\frac{P_{j+1}}{P_j}\right) / \log\left(\frac{V_j}{V_{j+1}}\right)$	-
Finalização do ciclo			
W_{ent}	Trabalho que entra no sistema	$\sum W_j \geq 0$	kJ
W_{sai}	Trabalho que executado pelo sistema	$-\sum W_j < 0$	kJ
$W_{liquido}$	Trabalho líquido	$W_{sai} - W_{ent}$	kJ
Q_{ent}	Calor que entra no sistema	$\sum Q_j \geq 0$	kJ
η_t	Eficiência térmica	$W_{liquido}/Q_{ent}$	-
r_{bw}	Razão de volta de trabalho	W_{ent}/W_{out}	-

4.3 VALIDAÇÃO DO MODELO

O modelo elaborado e resumido na seção 4.2 foi implementado em linguagem Python, assim como os outros dois modelos de referência (modelo a Ar-Combustível e modelo de Tempo Finito de Adição de Calor), para que se prove que ao implementar as hipóteses simplificadoras que o novo modelo desconsidera, pode-se retornar aos modelos antigos, mostrando como o novo modelo está conceitualmente correto e mais abrangente do que os outros. E justamente por este modelo ser mais genérico que os outros dois, duas validações distintas foram realizadas, já que para um dos modelos não há um tempo finito de combustão, enquanto no outro modelo não há combustão.

Para a validação deste modelo um MCI foi modelado como sendo quadrado, tendo $V_{du} = 500 \text{ cm}^3$, de razão de compressão de 8:1 e razão de biela manivela de aproximadamente $r_{LR} = 3.6$. Como o modelo de ciclo Otto a ar-combustível possui uma adição de calor a volume constante, considera-se que a duração angular do processo de combustão é de $\delta = 0.01^\circ$, e o ângulo de ignição é metade deste, isto é, $\theta = -\delta/2$, de modo que este processo além de quase instantâneo está centrado em V_2 , o volume mínimo. As condições iniciais do fluido de trabalho

foram definidas como $T_0 = 293,15 \text{ K}$ e $P_0 = 100,0 \text{ kPa}$.

O combustível escolhido para se fazer a comparação com o modelo a Ar-Combustível foi o Octano, C_8H_{18} , cujas propriedades foram estabelecidas como sendo constantes e iguais a: $\bar{c}_{v,combustivel} = 0,187165855 \text{ kJ/mol.K}$ e $\bar{h}_{f,combustivel}^0 = -208,60 \text{ kJ/mol}$. Uma razão de equivalência de 1,0 foi admitida, e as quantidades de processos $N_a = 50$ e $N_c = 20$ foram definidas. Por fim, os valores dos calores específicos dos gases de combustão foram definidos como constantes conforme o sumário do modelo (Tabela 5), para ambos modelos. Os resultados da comparação estão na figura a seguir.

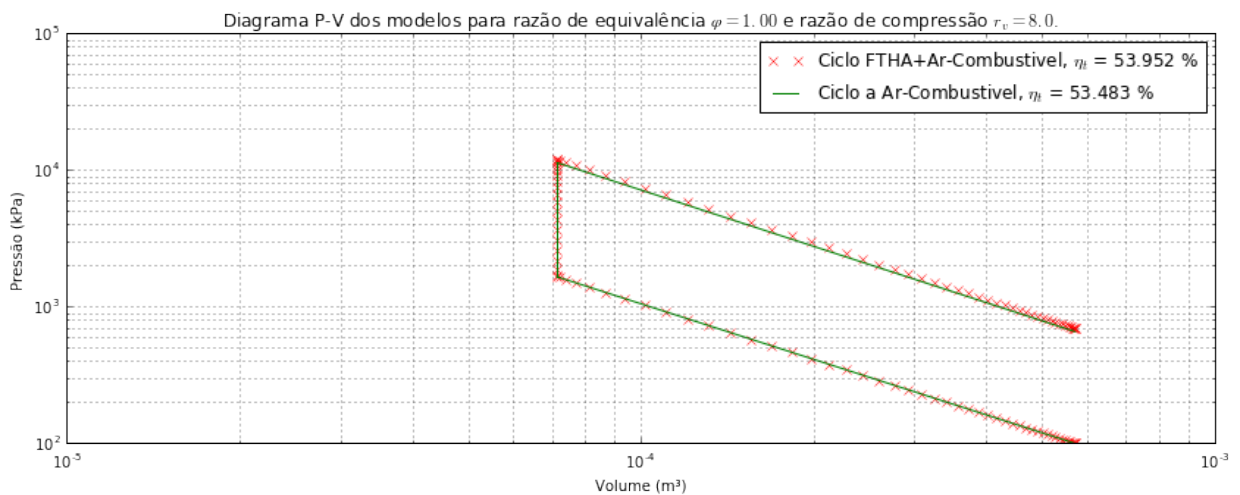


Figura 12: Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível (em verde) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (marcações em vermelho), com $r_v = 8,0$, $\delta = 0,01^\circ$ e $\phi = 1,0$.

Uma pequena diferença entre as eficiências pode ser notada, devido ao fato de a adição de calor pelo novo modelo possuir uma distribuição de calor diferenciada quanto a composição do fluido de trabalho, visto que sua composição vai alterando aos poucos, e, conseqüentemente c_v também se altera aos poucos, o que não pode ser observado no modelo desenvolvido em (BRUNETTI, 2012), no qual todo o calor, além de inserido instantaneamente, é distribuído inteiramente sobre a composição de gases queimados, levando em consideração apenas o c_v destes. Tendo isto, é possível, a partir de algumas considerações, obter o modelo de ciclo Otto a ar-combustível anterior desde que se admita um intervalo angular de combustão suficientemente pequeno.

Para a validação do novo modelo para com o modelo de Tempo Finito de Adição de Calor desenvolvido em (NAAKTGEBOREN, 2017), os parâmetros de operação foram alterados para que o sistema rode com apenas ar puro, sem quantidade alguma de combustível, ou seja, $\phi = 0,0$, que leva a $n_F = 0,0$, e uma fonte de calor externa foi utilizada para se adicionar ao

sistema uma quantidade de calor de $1000,0 \text{ kJ/kg}$. Como este modelo de Tempo Finito de Adição de Calor já se encontra validado, parâmetros diferentes dos anteriores foram admitidos para a combustão, isto é: $\theta = -10^\circ$, $\delta = 90^\circ$ e $N_c = 30$.

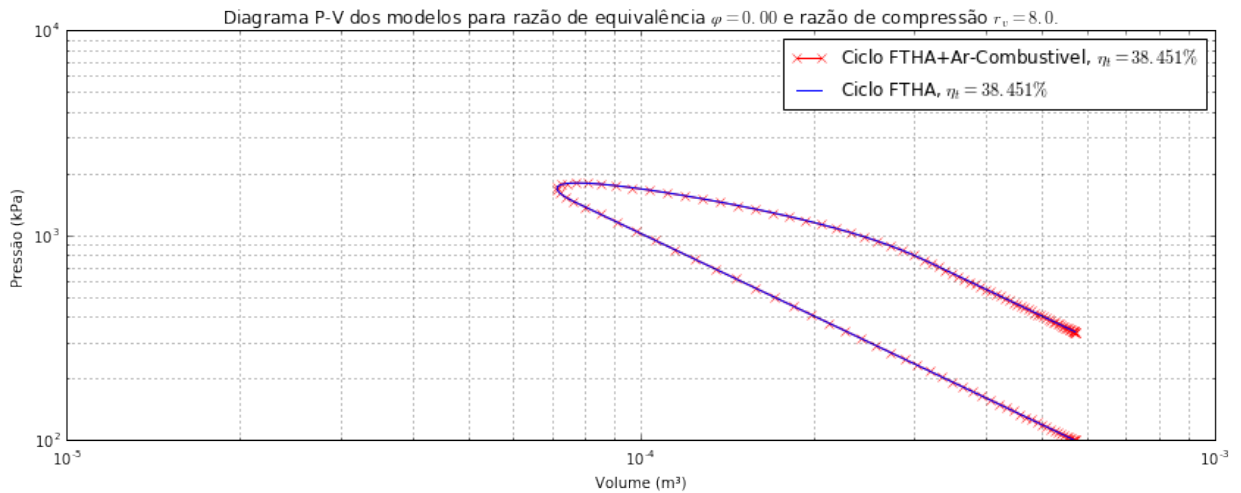


Figura 13: Diagrama P-V para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (marcações em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.0$.

Para este caso, verificou-se uma precisão de até 5 algarismos significativos para a eficiência, e uma sobreposição excelente das duas curvas, indicando que o modelo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor é capaz de reproduzir o modelo de Tempo Finito de Adição de Calor com gás ideal, desde que não se tenha alterações químicas ocorrendo no sistema.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Tendo validado o modelo de ciclo Otto a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor, alguns outros testes foram realizados para este modelo, e seus diagramas de $P - V$ podem ser encontrados a seguir.

Os testes foram realizados utilizando o mesmo motor utilizado para a validação, com $V_{du} = 500 \text{ cm}^3$, razão de compressão $r_v = 8 : 1$, e razão de biela-manivela de aproximadamente $r_{LR} = 3.6$. O combustível utilizado novamente foi o octano, C_8H_{18} , e as condições do estado inicial dos testes foram definidas como ($T_0 = 300K$, $P_0 = 100kPa$). Assumiu-se ainda, para as primeiras simulações, que se trata de uma carga nova de combustível, de modo que a fração residual de gases queimados no sistema é nula.

Os principais parâmetros de operação do motor foram definidos como sendo $\delta = 90^\circ$ e $\theta = -\delta/2$, a fim de centralizar a combustão em torno do volume mínimo do sistema. Os testes foram divididos em três principais casos, e os diagramas $P - V$ foram obtidos tanto em escala linear quanto em escala logarítmica.

- Caso 1: Comparação com modelo de ciclo de Tempo Finito de Adição de Calor.

Neste primeiro caso, o sistema foi inicializado com uma razão de equivalência de $\varphi = 0,5$, e os resultados foram comparados com o modelo de (NAAKTGEBOREN, 2017) rodando com ar puro como FA. A quantidade específica de calor inserida no sistema, em kJ/kg , foi obtida através da equação de entalpias de formação, e ambos os modelos receberam esta mesma quantidade. Os resultados são expostos nas figuras 14 e 15.

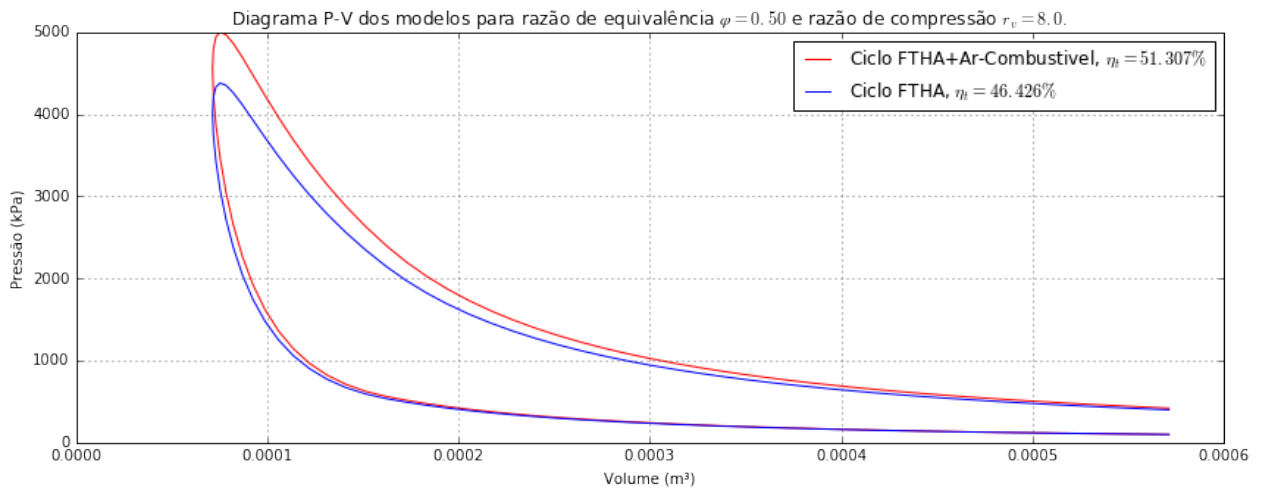


Figura 14: Diagrama P-V para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$.

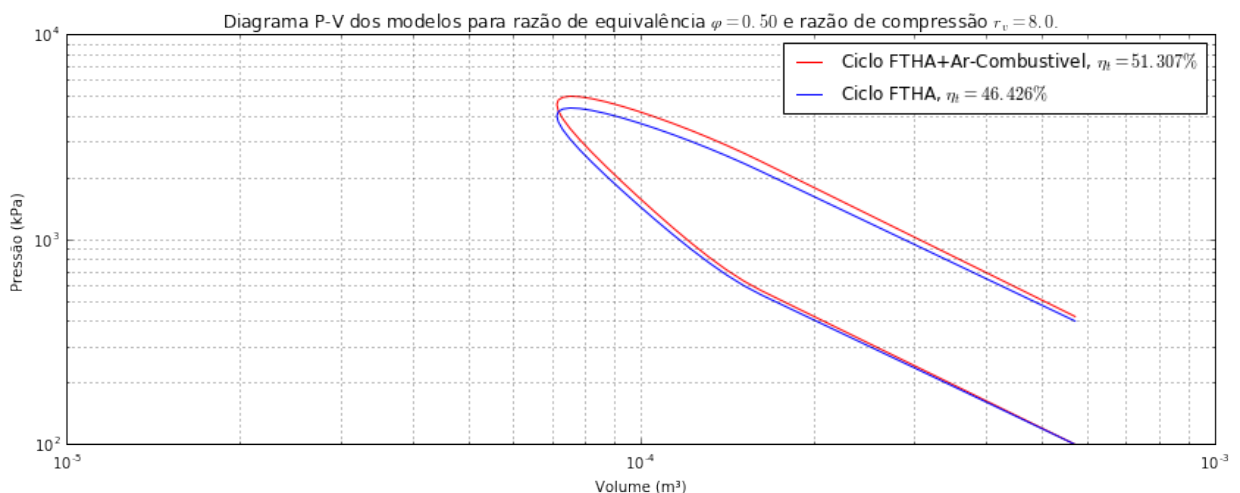


Figura 15: Diagrama P-V para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$, em escala logarítmica.

Verificou-se que uma eficiência de $\eta_t = 46,426\%$ foi atingida pelo ciclo Otto a ar puro, com constantes de aproximadamente $k = 1,334$ e $\bar{c}_v = 24,873 \text{ kJ/kmol.K}$, enquanto que o ciclo Otto a ar-combustível apresentou uma eficiência de $\eta_t = 51,307\%$, para $\bar{c}_v = 22,321 \text{ kJ/kmol.K}$ e $k = 1,372$ antes da combustão e $\bar{c}_v = 21,741 \text{ kJ/kmol.K}$ e $k = 1,382$ depois da combustão, o que explica a diferença entre as áreas entre curvas, já que por definição $k = 1 + R_u/\bar{c}_v$, de modo que um \bar{c}_v menor retorna um k maior, aumentando o valor da constante PV^k . O comportamento destes calores específicos em base molar e constantes k são observados nas figuras 16 e 17 a seguir.

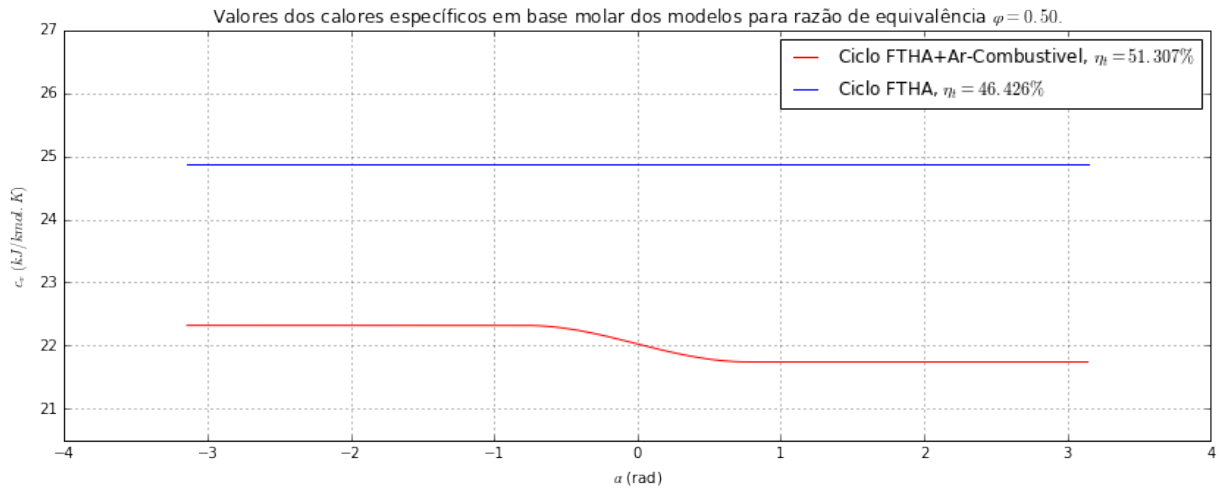


Figura 16: Diagrama \bar{c}_v - α para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$.

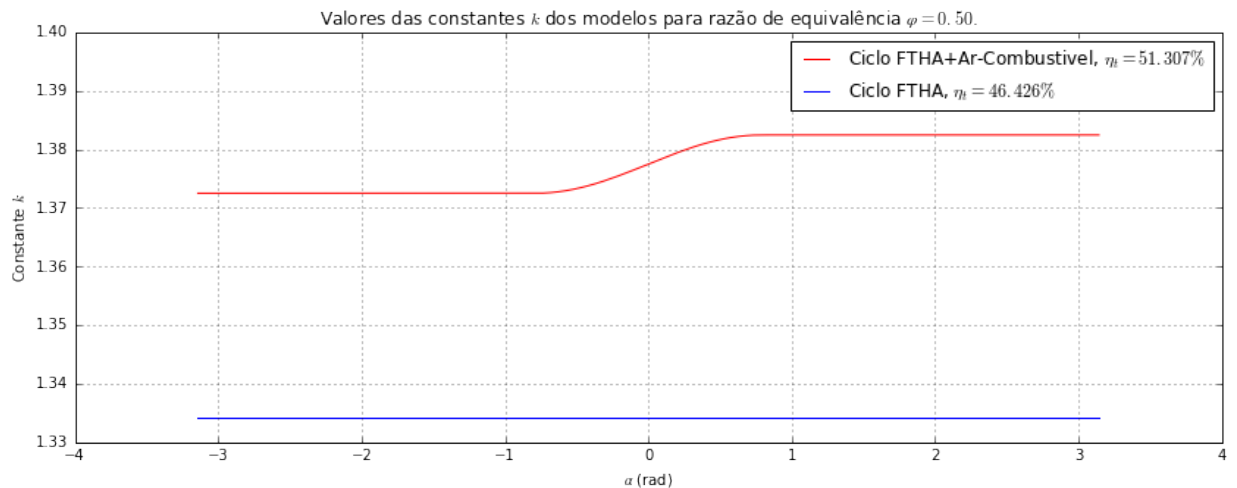


Figura 17: Diagrama k - α para o ciclo com tempo finito de adição de calor (em azul) e para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor (em vermelho), com $r_v = 8.0$, $\delta = 90.0^\circ$ e $\varphi = 0.5$.

Estes gráficos representam a alteração de \bar{c}_v e da constante k ao longo da duração angular do ciclo, de $-\pi \leq \alpha \leq \pi$, onde no ciclo com Tempo Finito de Adição de calor não há alteração alguma devido à ser uma substância pura, enquanto no novo modelo é possível observar que a alteração de composição química no processo de combustão afeta diretamente a alteração de propriedades, conforme a definição de $y(\alpha)$ prevê.

- Caso 2: Comparação entre diferentes valores de φ .

Para esta simulação, o novo modelo de ciclo Otto foi utilizado, de forma que três diferentes valores de razão de equivalência foram escolhidos para serem testados, $\varphi = \{0,5;$

1,0; 1,5}, e o mesmo motor, com mesmos parâmetros de operação que no caso anterior, foi utilizado para executar a simulação. Os diagramas desta simulação foram sobrepostos e podem ser vistos nas figuras 18 e 19, com suas eficiências e quantidades de calor por unidade de massa.

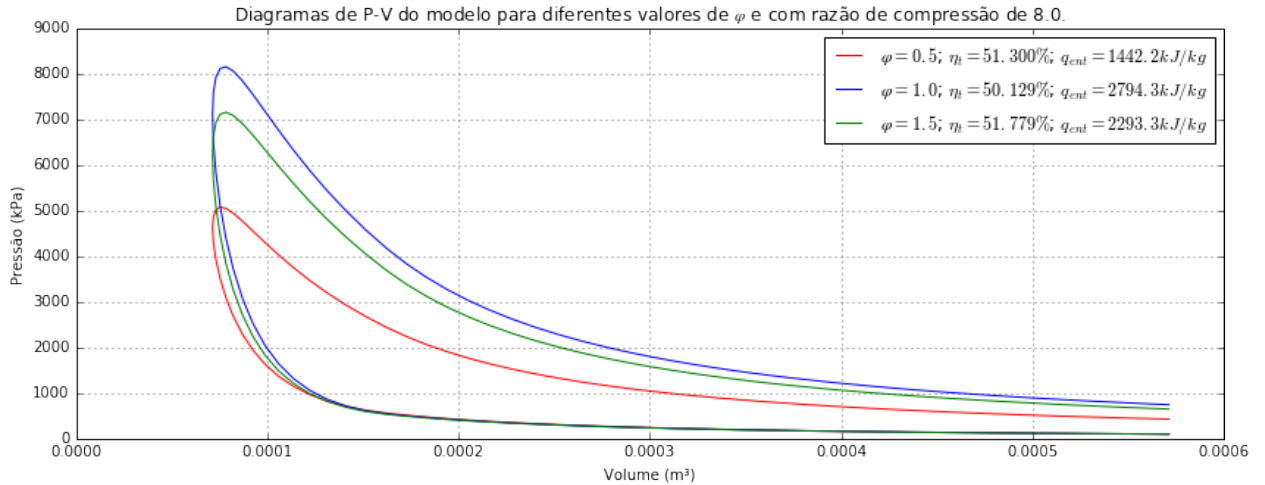


Figura 18: Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de φ , com $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$.

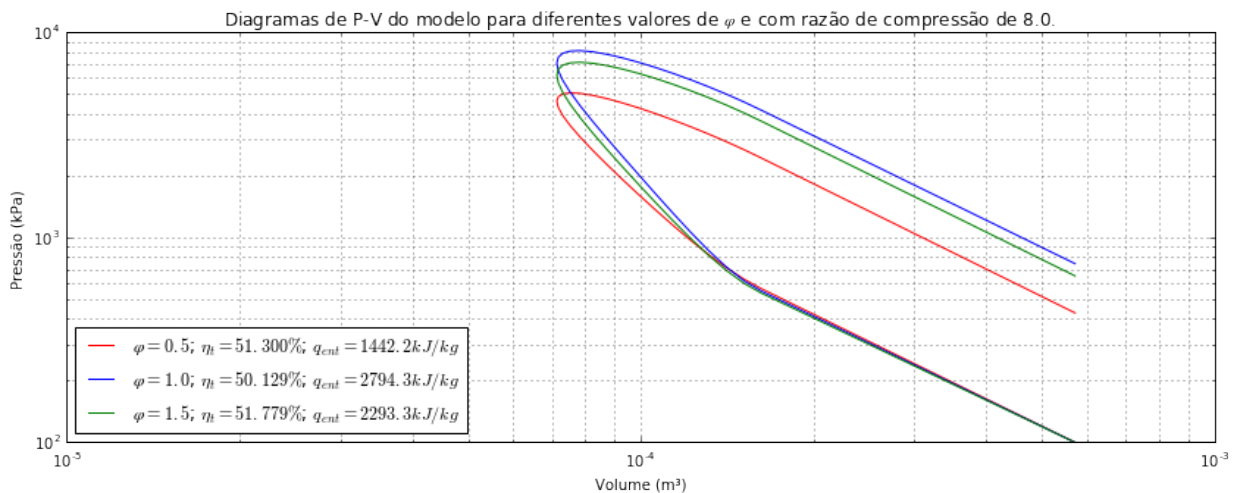


Figura 19: Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de φ , com $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$, em escala logarítmica.

Os valores correspondentes de eficiências térmicas para as diferentes razões de equivalência foram de $\eta_t = 51,300\%$ para $\varphi = 0,5$, de $\eta_t = 50,129\%$ para $\varphi = 1,0$ e de $\eta_t = 51,779\%$ para $\varphi = 1,5$. O menor valor de calor liberado conforme expectável foi para o caso em que há excesso de oxigênio no sistema, visto que uma menor massa de combustível é inserida e, conseqüentemente, uma menor quantidade de calor é gerada, porém a eficiência deste modelo se apresentou maior que para $\varphi = 1.0$, devido ao fato de uma grande quantia de ar no

sistema aproximá-lo de um ciclo a ar puro. Apesar de a quanta estequiométrica de combustível-retornar maior quantidade de calor por unidade de massa, a maior eficiência foi verificada no ciclo de $\varphi = 1,5$, que possui aproximadamente 500 kJ/kg a menos de calor sendo inserido, mas a presença de CO na mistura dos gases de combustão produz um menor valor de $\bar{c}_{v,m}$, visto que $\bar{c}_{v,CO} = 20,839 \text{ kJ/kmol.K}$, enquanto que o calor específico do CO_2 , que é formado em composições ricas, é de $\bar{c}_{v,CO_2} = 28,738 \text{ kJ/kmol.K}$.

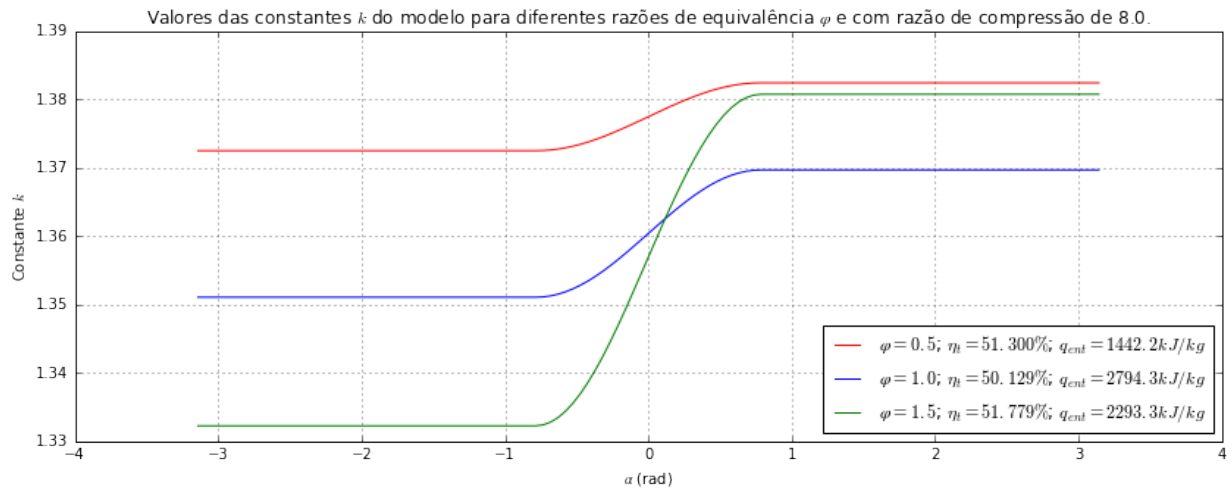


Figura 20: Diagrama k - α para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de φ , com $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$.

Esta figura 20 demonstra o conceito de que um maior valor da constante k na expansão leva a uma maior eficiência, devido a um menor valor de $\bar{c}_{v,m}$ dos produtos.

- Caso 3: Efeito de $\zeta(P, r_v)$ no sistema com Hidrogênio como combustível.

Para o último caso, utilizou-se a equação 71 para se obter a fração de gases residuais no sistema, considerando que a pressão de escape seja a atmosférica, de aproximadamente 100 kPa. Os parâmetros de motor e de operação foram, novamente, considerados os mesmos que os anteriores, e uma razão de equivalência de $\varphi = 1,0$ foi admitida. Todavia, a fim de demonstrar a condição de independência do modelo a combustíveis a base de carbono, o combustível utilizado para este caso foi o gás hidrogênio, H_2 , de $\bar{c}_v = 20,33136 \text{ kJ/kmol.K}$ e, por ser uma substância pura, $\bar{h}_f^0 = 0,0 \text{ kJ/kmol}$. Os ciclos para $\zeta = 0,0$ e $\zeta = \zeta(100,0,8,0)$ podem ser observados nas figuras 21 e 22.

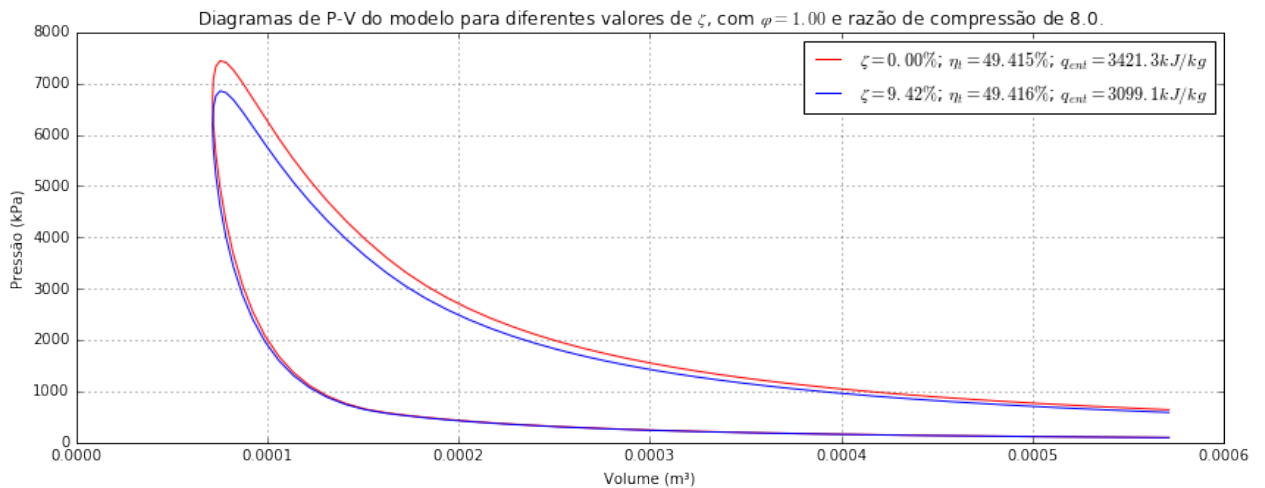


Figura 21: Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de ζ , com $\varphi = 1.0$, $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$.

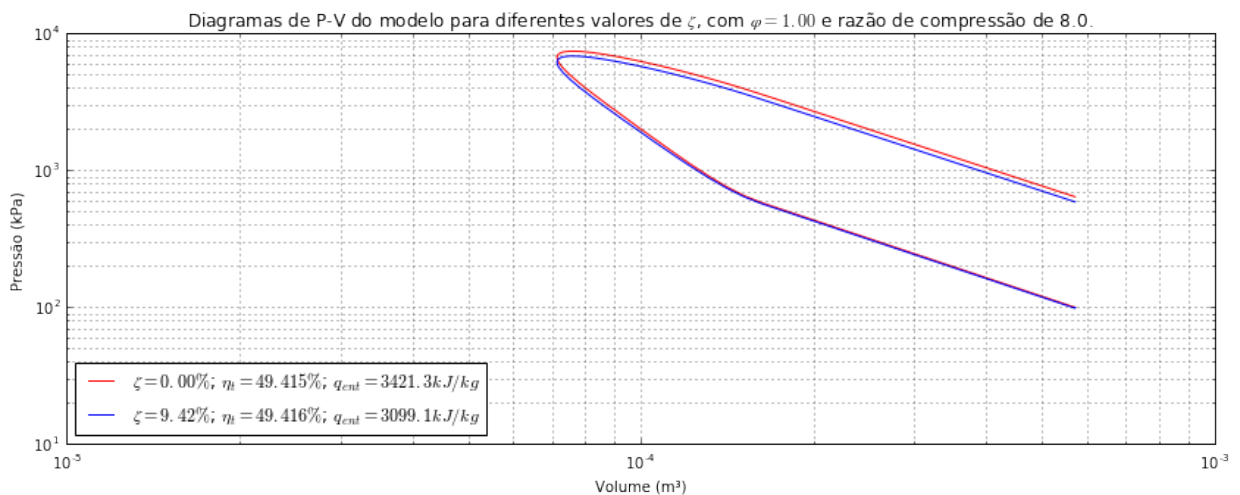


Figura 22: Diagrama P-V para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de ζ , com $\varphi = 1.0$, $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$, em escala logarítmica.

Apesar de o ciclo sem frações de gases residuais atingir pressões pouco maiores após a combustão, esta diferença não foi suficiente para que houvesse um acréscimo ou decréscimo de eficiência significativa no sistema, mesmo com a diferença de aproximadamente $322,2 \text{ kJ/kg}$ de calor gerado na combustão. Sendo assim, para $\zeta = 0.00\%$ a eficiência térmica foi de $\eta_t = 49,415\%$, enquanto que para $\zeta = 9,42\%$, obteve-se uma eficiência de $\eta_t = 49,416\%$. Apesar de não haver grande mudança de eficiência, a diferença entre quantias de calor por unidade de massa de ambos ciclos mostra que houve alteração na massa de combustível que adentra o sistema, e esta diferença pode ser notada na figura 23 a seguir.

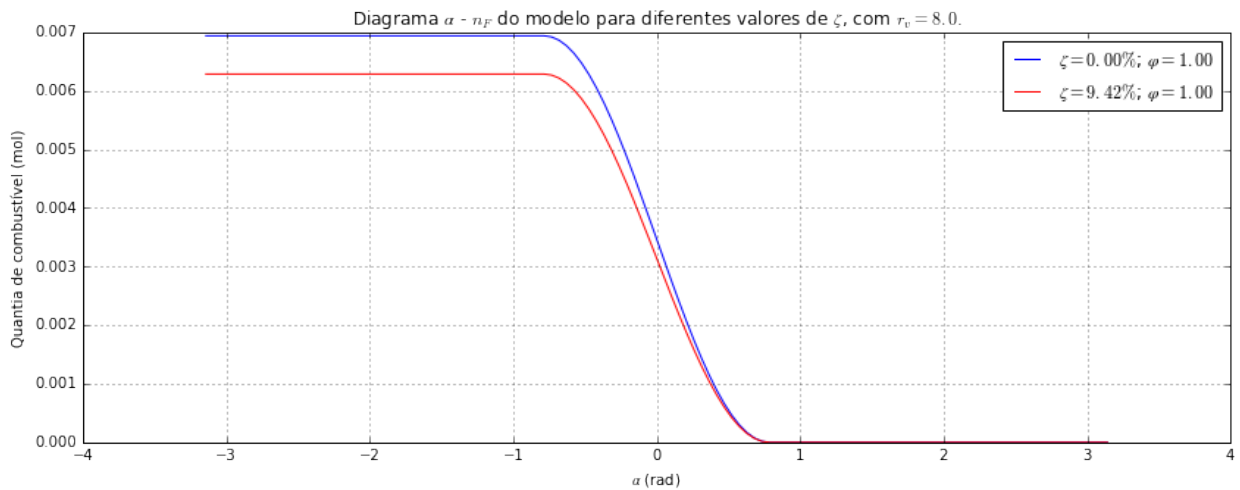


Figura 23: Diagrama $n_F - \alpha$ para o ciclo a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor para diferentes valores de ζ , com $\varphi = 1.0$, $r_v = 8.0$ e $\delta = 90.0^\circ$.

Nota-se uma maior quantia de mols de combustível no sistema de $\zeta = 0.00\%$, obviamente, porém a diferença entre as quantias é de uma ordem pequena demais para alterações significantes serem notadas na eficiência do sistema. É possível verificar neste gráfico que durante o processo de combustão ocorre uma queda de n_F enquanto o combustível queima, e durante a expansão não há mais combustível no sistema em ambos os casos, conforme previsto em teoria.

Com estes resultados complementando a capacidade de reproduzir resultados satisfatórios do novo modelo de ciclo Otto a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor, os futuros estudos de modelagem e simulações de ciclo Otto passam a ter uma precisão mais considerável para que os projetos de motores de combustão interna com ignição por centelha passe a ter uma parte de simulação muito mais considerável do que atualmente, visto que ainda há uma consideração muito maior por estudos empíricos nesta área. Com isto, os resultados do trabalho de conclusão de curso são concluídos com êxito relativo aos objetivos discutidos em 1.1, de forma que o modelo foi desenvolvido no tópico 4, e implementado e validado no tópico 4.3, e diversas curvas de pressão por volume foram obtidas para diferentes casos.

6 SUGESTÕES PARA FUTUROS ESTUDOS

Neste tópico, alguns possíveis futuros estudos na área de MCI a partir deste modelo de ciclo Otto desenvolvido são sugeridos.

Com a implementação do sumário do modelo de maneira adequada, alguns ensaios de sensibilidade em relação aos parâmetros de entrada podem ser realizados, isto é, alguns estudos de casos podem ser feitos para diferentes valores de S , D , L , r_v , N , θ , t_c , T_0 , P_0 , e φ , visando explorar possíveis resultados que não são tão esperados teoricamente, revelando comportamentos que antes não podiam ser simulados.

A obtenção da curva de pressão por α por rotação de virabrequim para alguns motores, assim como uma possível relação entre a razão de equivalência combustível-ar φ e esta rotação, visando reproduzir estas curvas que são obtidas a partir de sensores em motores reais, como na figura 3.

Definir parâmetros de um determinado motor e mantê-los fixos, e inserir como combustível uma mistura de outros combustíveis, como, por exemplo, uma mistura de C_8H_{18} e H_2 , a fim de se verificar possíveis diferenças devido a diferentes quantias de calor liberadas nas reações, e diferentes tempos de combustão. De acordo com (MARTIN; HEYWOOD, 1977), pode-se estimar que o tempo de combustão de certa massa de gás hidrogênio é aproximadamente 10 (dez) vezes menor que o tempo de combustão de mesma massa de gasolina, de modo que a duração angular de combustão δ é diretamente afetada e proporcional a esta razão. Ao se reduzir esta duração angular δ , espera-se que o sistema apresente maior eficiência térmica, assim como menor temperatura de escape, conforme demonstrado em (NAAKTGEBOREN, 2017).

Por fim, um último estudo que pode se realizar a fim de comparar o novo modelo com motores reais, é tentar reproduzir por meio de simulações os resultados de artigos experimentais que possam ter sido publicados na área, visando encontrar o quão longe este se encontra de um modelo que possa ser utilizado para projetos de MCI com ignição por centelha.

7 CONCLUSÕES

O novo modelo de ciclo Otto a Ar-Combustível com Tempo Finito de Adição de Calor forneceu excelentes resultados já na validação, visto que este foi capaz de replicar exatamente o modelo de Tempo Finito de Adição de Calor desenvolvido em (NAAKTGEBOREN, 2017), desde que não haja combustível adentrando o sistema, e também foi capaz de reproduzir com boa precisão o modelo de ciclo Otto a Ar-Combustível desenvolvido em (BRUNETTI, 2012), demonstrando ainda o porquê deste não ser viável, não só pela dependência a combustíveis a base de carbono, mas também pela incapacidade de se alterar a composição química do FA aos poucos, devido ao processo de combustão ser instantâneo.

Já nas simulações com a implementação em python, o modelo apresentou características bem singulares que não eram possíveis de se observar com outros modelos. A partir do estudo de casos elaborado no tópico 5, demonstrou-se que o modelo é capaz de reproduzir condições de operação que antes precisavam ser obtidas empiricamente, e nenhum dos resultados foi completamente fora do que se esperava, corroborando a justificativa deste trabalho (Tópico 1.2), de que os modelos de ciclo Otto precisam ser melhorados para que a simulação passe a fazer parte dos projetos de MCI.

O modelo obtido, validado e resumido na seção 4.2 é relativamente simples, se a quantidade de processos N_a e N_c forem consideradas baixas é possível até resolvê-lo sem implementação computacional, de modo que este possa até ser adaptado para aulas específicas de MCI para cursos de engenharia mecânica.

REFERÊNCIAS

- BELL, I. et al. Pure and pseudo-pure fluid thermophysical property evaluation and the open-source thermophysical property library coolprop. **Industrial & Engineering Chemistry Research.**, v. 53, n. 6, p. 2498 – 2508, 2014. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie4033999> / <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ie4033999>>.
- BRUNETTI, F. **Motores de Combustão Interna**. [S.l.]: Maua, 2012.
- CENGEL, Y. A.; BOLES, M. A. **Termodinâmica**. [S.l.]: Boston, 2002.
- EBRAHIMI, R. Thermodynamic simulation of performance of an irreversible otto cycle with engine speed and variable specific heat ratio of working fluid. **Arab J Sci Eng**, 2014.
- HERNANDEZ, A.; MEDINA, A.; AL, J. R. J. et. On an irreversible air standard otto-cycle model. **European Journal of Physics**, 1995.
- HEYWOOD, J. B. **Internal Combustion Engine Fundamentals**. [S.l.]: McGraw-Hill series in mechanical engineering, 1988.
- KOTZ, J. C. **Química geral e reações químicas**. [S.l.]: Cengage Learning, 2009.
- KRUSIN, D.; PROCACIA, I.; ROSS, J. On the efficiency of rate processes. power and efficiency of heat engines. **The Journal of Chemical Physics**, 1978.
- KUNZ, O. et al. The gerg-2004 wide-range equation of state for natural gases and other mixtures. **VDI Verlag GmbH**, 2007.
- LILEY, P. Maximum work output for gas cycles with constraint. **International Journal of Mechanical Engineering Education**, 1999.
- MARTIN, M. K.; HEYWOOD, J. B. Approximate relationships for the thermodynamic properties of hydrocarbon-air combustion products. **Combustion Science and Technology**, v. 1, 1977.
- MOZURKEWICH, M.; BERRY, R. Optimal paths for thermodynamic systems: The ideal otto cycle. **Journal of Applied Physics**, 1982.
- NAAKTGEBOREN, C. An air-standard finite-time heat addition otto engine model. **International Journal of Mechanical Engineering Education**, v. 45, n. 2, p. 103–119, April 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1177/0306419016689447>>.
- OZCAN, H. The effects of heat transfer on the exergy efficiency of an air-standard otto cycle. **Heat Mass Transfer**, 2011.
- RUBIN, M. Optimal configuration of a class of irreversible heat engines. **i. Phys Rev A**, 1979.

RUBIN, M. Optimal configuration of a class of irreversible heat engines. **ii. Phys Rev A**, 1979.

SALAMON, P.; NITZAN, A. Finite time optimizations of a newton's law carnot cycle. **The Journal of Chemical Physics**, 1981.

WYLEN, G. V.; SONNTAG, R. E.; AND, C. B. **Fundamentos da Termodinâmica Clássica**. 4. ed. [S.l.: s.n.], 1969.

ANEXO A – ALGORITMOS PARA RESOLUÇÃO DO MÉTODO DE TEMPO FINITO DE ADIÇÃO DE CALOR

Algorithm 1 Cycle loop initialization

Require: engine \mathcal{E} dictionary with named engine parameters $\mathcal{E}[\{\omega, D, L, R, V_2, \text{ and } V_{du}\}]$;

Require: angles α_{min} , α_{max} , typically $-\pi$, $+\pi$, respectively;

Require: angles θ , and $\delta = \mathcal{E}[\omega]\Delta t_c$, eq. (19);

Require: integer stroke discretizations N_s , and N_q ;

Require: thermodynamic state (P_0, T_0) , and gas model or EoS;

Require: cumulative heat release model function, $g(\alpha)$, and q_{ent} , eqs. (20) and (21);

Require: isochoric, work, and energy convergence tolerances ϵ_v , ϵ_w , and ϵ_u , respectively.

- 1: initialize all quantities with index i as empty lists: α_i , v_i , q_i , w_i , n_i , P_i , T_i , and u_i ;
 - 2: calculate all α_i from eq. (24)
 - 3: $v_0 \leftarrow$ specific volume, from (P_0, T_0) and gas EoS
 - 4: $m \leftarrow V_0/v_0$
 - 5: calculate all $v_i = V(\alpha_i)/m$ from eq. (14)
 - 6: $i \leftarrow 0$
-

Algorithm 2 Cycle loop

- 1: **for** $i = 0$ to $2N_s + N_q - 1$ **do**
 - 2: evaluate q_i from eq. (23)
 - 3: solve for w_i , n_i , u_{i+1} , P_{i+1} , and T_{i+1} by Algorithm (4)
 - 4: **end for**
 - 5: $i \leftarrow i + 1$
 - 6: $q_i \leftarrow u_0 - u_i$
 - 7: $w_i \leftarrow 0$
 - 8: state- (i) = state-0 {for all state functions being tracked}
-

Algorithm 3 Cycle finalization

- 1: $w_{ent} \leftarrow \sum w_i \geq 0$ {work entering the system}
 - 2: $w_{out} \leftarrow -\sum w_i < 0$ {work done by the system}
 - 3: $w_{net} \leftarrow w_{out} - w_{ent}$ {net work done by the system}
 - 4: $q_{ent} \leftarrow \sum q_i \geq 0$ {heat entering the system}
 - 5: $q_{rej} \leftarrow -\sum q_i < 0$ {heat rejected by the system}
 - 6: $\eta_t \leftarrow w_{net}/q_{ent}$ {thermal efficiency}
 - 7: $r_{bw} \leftarrow w_{ent}/w_{out}$ {back work ratio}
 - 8: $MEP \leftarrow w_{net}/(\mathcal{E}[V_{du}]/m)$ {mean effective pressure}
 - 9: print or save report.
-

Algorithm 4 Solving for w_i , u_{i+1} , and n_i

```

1: if  $|v_i - v_{i+1}| \leq \varepsilon_v$  then
2:    $u_{i+1} \leftarrow u_i + q_i$ 
3:   determine  $T_{i+1}$  from Algorithm (5), or EoS
4:   determine  $P_{i+1}$  from EoS
5: else {Polytropic process}
6:    $j \leftarrow 0$ 
7:   initialize  $n_i$ ,  $w_i$ ,  $u_{i+1}$ ,  $T_{i+1}$ , and  $P_{i+1}$  as empty lists
8:    $n_i^j \leftarrow 1 + R_{gas}/c_v(T_i)$ 
9:    $w_i^j \leftarrow$  eq. (26) with  $n_i = n_i^j$ 
10:  while  $j = 0$  or  $|w_i^{j-1} - w_i^j| \geq \varepsilon_w$  do
11:     $u_{i+1}^j \leftarrow u_i + q_i + w_i^j$ , eq. (22) with  $w_i = w_i^j$ 
12:    determine  $T_{i+1}^j$  from Algorithm (5), or EoS
13:    determine  $P_{i+1}^j$  from EoS
14:    correct  $n_i^{j+1}$  from eq. (31)
15:     $j \leftarrow j + 1$ 
16:     $w_i^j \leftarrow$  eq. (26) with  $n_i = n_i^j$ 
17:  end while
18:  {revert from lists (see line 7) to converged values}
19:  finalize  $n_i$ ,  $w_i$ ,  $u_{i+1}$ ,  $T_{i+1}$ , and  $P_{i+1}$  as their last  $j$  element
20: end if

```

Algorithm 5 Finding T_κ so that $u(T_\kappa) = u_\kappa$ within a tolerance ε_u

Require: u_κ , the target u value;

Require: ε_u , the tolerance with respect to u ;

Require: function $c_v(T) = b_0 + b_1T + b_2T^2 + b_3T^3$;

Require: corresponding function $u(T) = b_0T + b_1T^2/2 + b_2T^3/3 + b_3T^4/4$;

```

1:  $\ell \leftarrow 0$ 
2:  $T_\kappa^\ell \leftarrow u_\kappa/b_0$ 
3: while  $\ell = 0$  or  $|u_\kappa - u(T_\kappa^\ell)| \geq \varepsilon_u$  do
4:    $u^\ell \leftarrow u(T_\kappa^\ell)$ 
5:    $c_v^\ell \leftarrow c_v(T_\kappa^\ell)$ 
6:    $T_\kappa^{\ell+1} \leftarrow T_\kappa^\ell + (u_\kappa - u^\ell)/c_v^\ell$ 
7:    $\ell \leftarrow \ell + 1$ 
8: end while
9:  $T_\kappa \leftarrow T_\kappa^\ell$ 
10: return  $T_\kappa$  {so that  $u(T_\kappa) = u_\kappa$  within  $\varepsilon_u$ }

```
