

Rafael Becker Meier

**ANÁLISE DO EFEITO DE ESTRATIFICAÇÃO NA
AUTOIGNIÇÃO CONTROLADA UTILIZANDO MODELO
MULTIZONAS EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA**

Dissertação submetida ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Mecânica.
Orientador: Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior, Ph.D.

Florianópolis
2016

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Becker Meier, Rafael

ANÁLISE DO EFEITO DE ESTRATIFICAÇÃO NA AUTOIGNIÇÃO CONTROLADA UTILIZANDO MODELO MULTIZONAS EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA / Rafael Becker Meier; orientador, Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior - Florianópolis, SC, 2016. 111 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. Estratificação térmica, modelo multizonas, Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI).
I. Antônio Martins de Oliveira Júnior, Amir. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

Rafael Becker Meier

**ANÁLISE DO EFEITO DE ESTRATIFICAÇÃO NA
AUTOIGNIÇÃO CONTROLADA UTILIZANDO MODELO
MULTIZONAS EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA**

Esta Dissertação foi julgada adequada para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Mecânica, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Santa Catarina.

Florianópolis, SC, 18 de abril de 2016.

Prof. Armando Albertazzi Gonçalves Jr, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina
Coordenador do Curso

Banca Examinadora:

Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Júnior, Ph.D.
Universidade Federal de Santa Catarina
Orientador

Prof. Leonardo Paes Rangel, Ph.D.
Engineering Simulation and Scientific Software - ESSS

Prof. Mario Eduardo Santos Martins, Ph.D.
Universidade Federal de Santa Maria

Prof. Rafael de Camargo Catapan, Dr. Eng.
Universidade Federal de Santa Catarina

*Dedico esse trabalho as pessoas que possibilitaram
todo meu crescimento como ser humano,
Cláudio Eduardo Meier e Lenise Becker Meier*

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais, Cláudio Eduardo Meier e Lenise Becker Meier por me darem todas as oportunidades de escolhas que eu gostaria de tomar na minha vida, além de me darem toda a estrutura ética que um ser humano deve ter. Também quero agradecer a eles pelo estímulo que deram desde pequeno à educação e a sua priorização durante a vida. Espero que eu tenha capacidade de fazer o que eles já fizeram.

Agradeço a minha namorada, Amanda Dal Piva Gresele por todo seu jeito de ser, companheirismo e atenção amorosa. Além disso, ressalvo sua paciência com minhas discussões infundadas com ela sobre evolução de taxas de reações em motores de combustão interna.

Agradeço ao Professor Amir pelas matérias lecionadas e orientação. Pessoalmente enfatizo que é excelente pessoa o que torna o trabalho realmente agradável e estimulante. Como professor, pela facilidade com que transmite as doutrinas físicas e por último, e com grande grau de marcação, por trazer a tona e clarear a base dos fundamentos físicos dando limite a qualquer divagação minha sobre hipóteses do trabalho.

E por fim, agradeço aos professores da pós-graduação em ciências térmicas da UFSC pois trouxeram uma quantidade de conhecimento inestimável mudando completamente a minha forma de pensar e como enxergar o mundo.

“Everything should be made as simple as possible, but not simpler.”

ALBERT EINSTEIN

RESUMO

Esse trabalho tem por objetivo analisar, via simulação numérica, o efeito de variações na temperatura da mistura no desenvolvimento da pressão na câmara de combustão e na tendência para detonação em motores operando em modo HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*). Em motores a combustão interna em geral, a carga ar-combustível após compressão no cilindro é afetada pela existência de camadas limites próximas às paredes da câmara de combustão, originando gradientes de temperatura na direção normal às paredes, os quais afetam a ignição e propagação da combustão. Nesse trabalho, para simular a estratificação térmica observada em motores, gradientes de temperatura foram impostos às zonas de reação do modelo multizonas e utilizados como variável independente. Contrário aos trabalhos publicados na literatura, a energia total contida na mistura ar-combustível foi mantida constante, de forma a isolar o efeito da estratificação térmica daqueles oriundos do aquecimento adicional da mistura ar-combustível, uma estratégia comumente utilizada para o controle de combustão em misturas pobres e condições de carga elevada. Para isso, a massa distribuída às diferentes zonas é determinada de forma a manter a energia térmica da mistura constante em todas as simulações. Simulou-se condições de operação com mistura pobre, iso-octano foi utilizado para representar o combustível, utilizou-se um mecanismo reduzido de cinética química e aplicou-se o método multizonas conforme disponível no pacote computacional ChemKin®. Os resultados obtidos foram comparados com aqueles reportados na literatura. Verificou-se que o controle energético dentro do sistema tem o efeito sobre os momentos de ignições térmicas, e dessa forma consegue-se diminuir as taxa com que a pressão aumenta. Porém, ficou evidente que em termos práticos, onde há o aumento da rotação existe o aumento da sensibilidade do motor à alteração da carga térmica, a característica do motor nos processos de expansão e compressão, além de cinética química devem se adaptar, ou mais precisamente, se sincronizar com a alteração da rotação para que não haja uma alta taxa líquida de calor liberado. Além disso, foi testado o uso de EGR como um recurso para controle da combustão. Dessa forma, foi mostrado que com a sua utilização foi possível elevar o potencial térmico do motor.

Palavras-chave: Homogeneous Charge Compression Ignition. Estratificação Energética. Espessura Térmica.

ABSTRACT

The work aims to analyze through numerical simulations on idealized conditions the operating capacity of the HCCI engine combustion process (*Homogeneous Charge Compression Ignition*), under high equivalence ratios with use a reduced kinetic mechanism of iso-octane as fuel. The result aims to achieve the conditions for the existence of the stable operation of the combustion at high loads with the engine always operating on the same thermodynamic potential. With this, all the work is based on the maintenance of the initial energy provided for in the first case validated by the literature. The control of the pressure increase rate is the parameter of most interest to be analyzed, but the changes made for this purpose modify the behavior of combustion. The main issue addressed is the inhomogeneity of the temperature within the system. This property inherent to the engine enables control over the thermal ignitions and as a consequence temperature width is created that serves as the main responsible for the delay of the ignition between adjacent volumes and deflagration speed of ignitions. With use of simulation module of software ChemKin® HCCI combustion processes multi zone, temperatures gradients were imposed as an independent variable to the reaction system of the engine and thereby determine mass distributions as a dependent variable in order to maintain a constant energy. Thus was set the parameter space of energy stratification for the reactive system. The results obtained through the established methodology were compared with the literature. It was found that the energy control in the system has the effect on ignition delay time and thus achieves decreasing the rate at which the pressure increases. However it was evident that in practice terms, where with an increase of engine speed the sensitivity at relation at thermal charge change is increased and then, the characteristics of the engines in the expansion and compression processes as well as chemical kinetics must adapt, or more precisely, to synchronize with changing the rotation speed so that no there is a high net rate of heat released. Furthermore, the use of EGR is shown very efficient in the control of reaction rates increasing the thermal potential of engine.

Keywords: Homogeneous Charge Compression Ignition. Energy Stratification. Temperature Width.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1.1 - Comparação entre os processos de combustão.	30
Figura 2.1 - Diagrama mostrando as regiões onde ocorrem os tipos de combustão SI, CI, LTC e HCCI.	34
Figura 2.2 - Resultados experimentais da pressão medida no cilindro comparados com simulações realizadas no software Chemkin. (a) Curvas de pressão transientes medidas no experimento e previstas no ChemKin .(b) Valores máximos de PRR obtidos nos experimentos e das simulações com ChemKin. Motor operando em 1200 rpm, CA50=TDC e utilizando iso-octano.	36
Figura 2.3 - Imagens de quimiluminescência da ignição em um motor HCCI operando com grande quantidade de gases residuais. (a) Imagem tomada do topo da câmara. (b) Imagem tomada na lateral da câmara. Combustível: iso-octano, 1200 rpm, $\phi = 0,38$, CA50=368°. Os números ao lado direito inferior das figuras representam a intensidade luminosa para captura da imagem pela câmera usada no trabalho.	38
Figura 2.4 - Relações entre espessura térmica e temperatura média.	40
Figura 2.5 - Atraso da combustão. Modelo numérico comparado com modelo experimental. Iso-octano, 1200 rpm, $\phi = 0,38$, TW=20K.	41
Figura 2.6 - Comparação entre os dois exemplos de técnicas de implementação de EGR interno. As siglas representam: EVO (<i>Exhaust Valve Opened</i>), EVC (<i>Exhaust Valve Closed</i>), IVO (<i>Intake Valve Opened</i>), IVC (<i>Intake Valve Closed</i>) e CAD (<i>Crank Angle Degree</i>).	43
Figura 2.7 - Espectro de frequência para amplitude da pressão.	45
Figura 2.8 - Espectro de frequência para amplitude de vibração do bloco do motor. Lado esquerdo, espectro de frequência para detonação em SI. Lado direito, espectro de frequência para HCCI.	46
Figura 2.9 - Taxa de compressão crítica para a auto ignição de hidrocarbonetos.	48
Figura 2.10 - Medição de pressão durante a ignição em máquina de compressão rápida de uma mistura de iso-octano/ar, com razão de equivalência combustível/ar de 0,4, pressão de 4,16 MPa e temperatura de 827 K, realizado em uma máquina de compressão rápida.	50
Figura 2.11 - Curva de atraso de ignição versus inverso da temperatura medida (pontos) e prevista (linhas) para a oxidação de (a) iso-octano com ar em tubo de choque (medições de Fieweger, Blumenthal e Adomeit, 1994, 1997), na composição estequiométrica, para diferentes pressões (CURRAN <i>et al.</i> , 2002) e (b) n-heptano com ar medido em tubo de	

choque (altas pressões) (CIEZKI e ADOMEIT, 1993) e máquina de compressão rápida (baixas pressões) (MINETTI <i>et al.</i> , 1995) na composição estequiométrica, para diferentes pressões (LIU <i>et al.</i> , 2004).	52
Figura 2.12 - Medição de pressão durante a ignição em máquina de compressão rápida de uma mistura de n-heptano/ar, com razão de equivalência combustível/ar de 1, pressão de 10,4 bar e temperatura de 689 K, realizado em uma máquina de compressão rápida.	53
Figura 2.13 - Calor liberado da combustão de um motor HCCI operando com n-heptano.....	54
Figura 2.14 - Curvas de pressão e calor liberado para combustíveis com diferentes RON's para mesma razão de equivalência.	55
Figura 2.15 - Duração da combustão do segundo estágio de ignição (BD_{2end}) em relação ao grau do virabrequim (CA) vs. razão de equivalência.	56
Figura 2.16 - (a) HRR, (b) Temperatura, (c) Pressão e (d) PRR. Linha vermelha indica correlação randômica de distribuição da mistura ar/combustível. Linha azul representa correlação negativa entre estratificação da mistura ar/combustível com a estratificação térmica. Linha preta mostra mistura homogênea em toda a região. Linha tracejada mostra o motor operando como compressor.	62
Figura 3.1 - Estratificação térmica e mássica.....	65
Figura 3.2 - Exemplos de distribuição de massa e temperatura para GPEM.	67
Figura 3.3 - Exemplos de distribuição de massa e temperatura para GNEM.....	68
Figura 3.4 - Variação da espessura térmica TW com a rotação do motor.	70
Figura 3.5 - Taxa de liberação de calor contínua vs. ângulo do virabrequim. Comportamento do HRR com a configuração do sistema.	72
Figura 3.6 - Taxa de liberação de calor do modelo multi zonas. Revela a discretização e sequência da combustão nas zonas para um resultado ilustrativo.	73
Figura 3.7 - Variação da pressão e os pontos onde são definidos os máximos PRR. É mostrado na Figura a identificação dos números das zonas.	74
Figura 4.1 - Modelo de curva de pressão para (a) trabalho com mecanismo cinético detalhado e (b) para mecanismo reduzido para iso-octano. (a) Compara o resultado experimental do motor com razão de compressão de	

17,6 e $\phi = 0,38$, com modelo numérico adiabático de razão de compressão de 15,9 e $\phi = 0,367$. (b) Emula o resultado numérico para mecanismo de cinética química reduzida. Temperatura central de 398 K, espessura térmica de 20 K à 1200 rpm com $\phi = 0,367$, CA50=368°. A temperatura termodinâmica do sistema em BDC, é 376,43 K.	78
Figura 4.2 -Gradiente de temperatura no BDC para o caso validado em Sjöberg, Dec e Cernansky (2005). O número de cada zona é identificado na Figura.....	79
Figura 4.3 - Resultado do histórico de temperatura para curva de pressão validada. Evolução da temperatura do modelo multizona para cada zona.	80
Figura 4.4 - Comparação entre curvas de pressão. Ambas as curvas com TW=20K e 1200 rpm, variando com $\phi = 0,244$ e CA50=TDC e $\phi = 0.367$ CA50=368°.....	81
Figura 4.5 - Distribuição da Energia vs. Massa Acumulada. Uso do GPEM mínimo como possibilidade de usar o maior potencial de homogeneidade do sistema.....	82
Figura 4.6 - PDF da energia parcial à partir das variações da T_m	83
Figura 4.7 - Variação da pressão sobre diferentes temperaturas da região central, TW=20K.....	84
Figura 4.8 - Início da combustão vs. Duração da Combustão, TW=20K.	85
Figura 4.9 - Pressão vs. CA. Efeito do aumento de espessura térmica relatado em Sjöberg, Dec e Cernansky (2005).....	86
Figura 4.10 - Efeito da espessura térmica sobre a pressão com GPEM.	87
Figura 4.11 - Comparação entre os modelos de estratificação térmica e mássica e comparação ente estratificações positivas e negativas.	88
Figura 4.12 - Desvio padrão para gradiente negativo de estratificação mássica com TW=20K.....	89
Figura 4.13 - Início da combustão vs. Duração da Combustão com TW=20K.	90
Figura 4.14 – Curvas de pressão para comparação entre desvio padrão máximo e mínimo para gradiente negativo de estratificação mássica... ..	91
Figura 4.15 - Variação do PRR máximo vs. Temperatura inicial com TW constante. Resulta em alteração do T_m	92
Figura 4.16 - Variação do PRR máximo vs. TW com a temperatura inicial constante. Resulta em alteração do T_m	93

Figura 4.17 - Desvio padrão vs. temperatura média. Mostra a relação fundamental entre o DP e o PPR e comportamento inverso das curvas de GP e GN.....	94
Figura 4.18 - Efeito da espessura térmica e temperatura média sobre o PRR em GNEM.	95
Figura 4.19 - Efeito da espessura térmica e temperatura média sobre a duração da combustão em GNEM.	96
Figura 4.20 - Efeito da espessura térmica e temperatura média sobre o desvio padrão em GNEM.....	97
Figura 4.21 - PRR para manter RI em $5 MW / m^2$ com variação de rotação. Condições de $\phi = 0,367$ e $CA50=368^\circ$. Figura adaptada do mecanismo do iso-octano de LLNL para o mecanismo reduzido de Xin, Law e Lu (2009).....	99
Figura 4.22 - Espessura térmica requerida para manter RI em $5 MW / m^2$ com variação de rotação. Condições de $\phi = 0,367$ e $CA50=368^\circ$. Figura adaptada do mecanismo do iso-octano de LLNL para o mecanismo reduzido de Xin, Law e Lu (2009).....	99
Figura 4.23 - Energia necessária para manter o sistema operando abaixo do RI limite em condições de $\phi = 0,367$ e $CA50=368^\circ$	100
Figura 4.24 - Mudança na estratificação mássica para gradiente negativo considerando todas as outras propriedades constantes.....	101
Figura 4.25 - Mudança na estratificação mássica para gradiente positivo considerando todas as outras propriedades constantes.....	102
Figura 4.26 - Temperaturas Máximas Limites vs. rotação para.....	103
Figura 4.27 - CA50 vs. rotação. Deslocamento do CA50 com aumento da temperatura média do sistema e rotação.	104
Figura 4.28 - Estratificação mássica vs. temperaturas médias limites. Ponto acima do eixo zero horizontal representa GP e abaixo GN.	104
Figura 4.29 - Pressão vs. ângulo do virabrequim. Comparação entre o deslocamento da curva de pressão devido a velocidade das reações. .	106
Figura 4.30 - HRR vs. ângulo do virabrequim. Utilização de GNEM com $T_m=371,27K$ $TW=20K$ e rotação de 1200 rpm para $\phi = 0,42$	107
Figura 4.31 - HRR vs. ângulo do virabrequim. Utilização de GNEM com $T_m=397,19 K$, $TW=16 K$ e rotação de 3600 rpm para $\phi = 0,42$	107
Figura 4.32 - Pressão vs. ângulo do virabrequim para 3600 rpm. Comparação entre uma diferença 1,5 K na temperatura sob altas rotações.	108
Figura 4.33 - Efeito da adição de EGR sobre a pressão. Condições de GPem com temperatura central de 408 K, $TW=50 K$ e $\phi = 0,367$	109

Figura 4.34 - Temperatura máxima vs. EGR. Motor operando com aumento progressivo da fração de EGR à 1200 rpm com TW=20 K e temperatura da zona central de 403,5 K.	110
Figura 4.35 - RI e CA50 vs. EGR. Motor operando com aumento progressivo da fração de EGR à 1200 rpm com TW=20 K e temperatura da zona central de 403,5 K.	110
Figura 4.36 - Temperaturas Máximas Limites vs. rotação para	111

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 - Especificações do motor	77
--	----

LISTA DE ABREVIACÕES

CA	<i>Crank Angle</i>
CAD	<i>Crank Angle Degree</i>
CA50	Ângulo do virabrequim onde 50% do calor é liberado
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
BD	<i>Burn Duration</i>
BDC	<i>Bottom Dead Center</i>
CI	<i>Compression Ignition</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DP	Desvio Padrão da Distribuição de Energia
EGR	<i>Exhaust Gas Recirculation</i>
EM	Estratificação Mássica
EVO	<i>Exhaust Valve Opened</i>
GN	Gradiente Negativo
GNEM	Gradiente Negativo de Estratificação Mássica
GP	Gradiente Positivo
GPEM	Gradiente Positivo de Estratificação Mássica
HCCI	<i>Homogeneous Charge Compression Ignition</i>
HRR	<i>Heat Rate Release</i>
HTHR	<i>High Temperature Heat Release</i>
IDT	<i>Ignition Delay Time</i>
IVC	<i>Intake Valve Closed</i>
IVO	<i>Intake Valve Opened</i>
LTC	<i>Low Temperature Combustion</i>
LTHR	<i>Low Temperature Heat Release</i>
NTC	<i>Negative Temperature Coefficient</i>
NVO	<i>Negative Valve Overlap</i>
PDF	<i>Probability Density Function</i>
PRR	<i>Pressure Rise Rate</i>
RCM	<i>Rapid Compression Machine</i>
RI	<i>Ringing Intensity</i>
RPM	Rotações Por Minuto
RON	<i>Research Octane Number</i>
SACI	<i>Spark-Assited HCCI</i>
SI	<i>Spark Ignition</i>
ST	<i>Shock Tube</i>
TDC	<i>Top Dead Center</i>
TW	<i>Temperature Width</i>
UHC	<i>Unburned HydroCarbon</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Romanos

A_i	Área de troca de calor da zona i
B	Diâmetro do pistão
c	Velocidade do som
c_p	Calor específico à pressão constante
h_c	Coefficiente de troca de calor de Woschini
h_w^i	Coefficiente de troca de calor por convecção da zona i
i	Número da zona
k	Número da espécie química
m_i	Massa contida na zona i
p	Pressão do sistema
R	Constante universal dos gases ideais
t	Tempo
T^i	Temperatura da zona i
T_m	Temperatura média das zonas
$\langle T \rangle$	Temperatura termodinâmica
Y_k^i	Fração mássica da espécie k na zona i
V^i	Volume da zona i
W_k	Massa molar da espécie k
W	Velocidade média do pistão

Símbolos Gregos

β	Fator de escala referente ao tipo de motor
γ	Razão entre calores específicos
ΔP	Amplitude da variação da pressão de uma onda sonora
θ	Ângulo do Virabrequim
ρ^i	Densidade da zona i

ϕ	Razão de equivalência
χ	Fração molar
$\dot{\omega}_k^i$	Produção molar da espécie k e zona i

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	29
1.1	OBJETIVOS	31
1.2	ORGANIZAÇÃO DO TEXTO	32
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	33
2.1	COMBUSTÃO EM HCCI.....	33
2.1.1	Taxa de aumento da pressão (PRR)	35
2.1.2	Estratificação térmica.....	38
2.1.3	Atraso da Combustão	40
2.1.4	Recirculação de gases de exaustão (EGR)	42
2.1.5	Ondas de Pressão	44
2.2	COMPORTAMENTO DOS COMBUSTÍVEIS EM AUTOIGNIÇÃO.....	47
2.3	MÉTODOS COMPUTACIONAIS	56
2.3.1	Formulação para o modelo multizonas.....	57
2.3.2	Modelos de CFD.....	60
3	MATERIAIS E MÉTODOS	63
3.1	MODELAGEM DO MOTOR	63
3.1.1	Condições iniciais.....	63
3.1.2	Estratificação térmica e mássica.....	65
3.1.3	Fração de EGR.....	68
3.1.4	Variação da espessura térmica	69
3.2	PARÂMETROS DE ANÁLISE	71
3.2.1	Referência de Combustão - CA50	71
3.2.2	Taxa de aumento de pressão	73
3.2.3	Critério para surgimento de ondas de pressão.....	74
3.3	PROCEDIMENTO DE CÁLCULO E ANÁLISE.....	75
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	76
4.1	DEFINIÇÃO DAS CONDIÇÕES INICIAIS	77

4.2	EFEITO DA ESTRATIFICAÇÃO DE MASSA.....	81
4.2.1	Efeito do Gradiente positivo de massa (GPEM)	81
4.2.2	Efeito da espessura térmica	85
4.2.3	Efeito do gradiente negativo de massa (GNEM).....	87
4.3	ANÁLISE DA TAXA DE AUMENTO DE PRESSÃO	91
4.4	VARIAÇÕES DE CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO	97
4.5	ADIÇÃO DE GASES DE RECIRCULAÇÃO	108
5	CONCLUSÕES FINAIS E PROPOSTAS DE TRABALHOS FUTUROS	112
5.1	CONCLUSÕES FINAIS	112
5.2	PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS	113
	REFERÊNCIAS.....	115

1 INTRODUÇÃO

Os motores a combustão interna estão entre as máquinas que mais exercem influência sobre as características sociais, tecnológicas, econômicas e ambientais do nosso planeta. Do ponto de vista tecnológico e ambiental, existem estudos sobre a implementação de métodos de combustão potencialmente vantajosos. Porém, visto que ainda não estão suficientemente amadurecidos, esses novos métodos de combustão ainda não foram colocados em uso em larga escala comercial.

Um exemplo desses novos métodos potencialmente vantajosos é a combustão em modo HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*), o qual reúne as principais qualidades dos modos SI (*Spark Ignition*) e CI (*Compression Ignition*). Tradicionalmente, o modo SI é caracterizado pela formação de uma mistura ar-combustível homogênea que é comprimida e uma centelha dá início a reação química que se propaga através de uma chama de deflagração. A razão de equivalência é mantida próxima a 1, resultando em motores com baixa emissão de gases poluentes e fuligem quando comparados aos motores CI. As principais desvantagens são a alimentação de combustível na fase de admissão, o modo de controle de carga, ou seja, o controle da potência produzida pelo motor, e a possibilidade de detonação da carga ar-combustível na operação em alta potência. A alimentação do combustível na admissão dilui a carga de ar, reduzindo a eficiência volumétrica do motor. O controle de carga é feito com o uso de uma válvula borboleta para regular a vazão mássica de ar aspirada pelo motor, o que gera uma perda de potência por bombeamento, resultando em uma baixa eficiência volumétrica. Devido à possibilidade de detonação durante a combustão, a pressão interna dentro do cilindro deve ser limitada, através, por exemplo, da regulagem do ponto de ignição e de estratégias de resfriamento da carga, resultando em redução da eficiência térmica. Por outro lado, o modo CI tradicional é caracterizado pela aspiração e posterior compressão de apenas ar. No momento ideal, o combustível é injetado na forma de um spray. Este encontra ar em temperatura suficientemente elevada, mistura-se molecularmente e sofre ignição térmica. A combustão se desenvolve através de uma chama que inclui características de chama pré-misturada e não pré-misturada. Entre a injeção de combustível e o início da combustão, o combustível líquido passa por mudanças físicas, como a atomização, coalescência e quebra de gotas, evaporação e formação de mistura. Uma parcela do combustível na extremidade do spray mistura-se com o ar e entra em ignição imediatamente após injeção. O restante do spray, afetado pelo aumento de temperatura causado pelo

aumento de pressão, mistura-se com o ar e entra em combustão em um modo típico de chama não pré-misturada. Como resultado, nas regiões internas do spray, onde há grande concentração de combustível, ocorre a formação de fuligem, enquanto que, em regiões periféricas do spray, pobres em combustível, ocorre a formação de NO_2 (óxidos de nitrogênio).

O processo de combustão HCCI une duas características dos modos SI e CI. A pré-mistura de combustível e ar é feita durante a admissão e compressão como no modo SI, enquanto que a ignição ocorre pela compressão da mistura, tal qual no modo CI. A Figura 1.1 ilustra a comparação entre os três processos. No modo HCCI, idealmente, ocorre uma combustão rápida com menor troca de calor com as paredes da câmara de combustão, resultando em um processo eficiente de conversão da energia do combustível. Além disso, como a combustão acontece idealmente ao mesmo tempo em todos os pontos da câmara de combustão e a mistura admitida é usualmente pobre em combustível, não ocorre a formação de pontos quentes que resultariam na emissão de NO_2 .

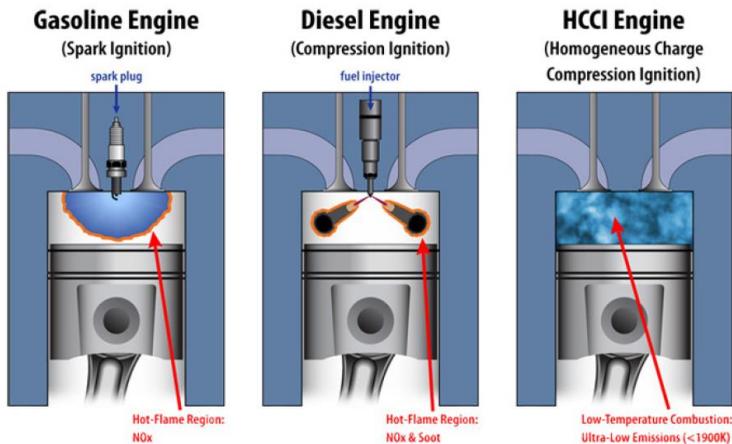


Figura 1.1 - Comparação entre os processos de combustão.

Fonte: Wijngaarden (2008, p. 14)

Entretanto, a ocorrência de combustão homogênea não é garantida, visto que a mistura ar-combustível apresenta naturalmente flutuações em composição e temperatura oriundas dos processos, que ocorrem em regime turbulento, de admissão, mistura e transferência de calor com as paredes da câmara de combustão, como sugerido visualmente no esquema da Figura 1.1. As variações espaciais e temporais de temperatura implicam em variações locais do atraso de ignição

químico, ou seja, do tempo necessário para desenvolver as etapas de iniciação e propagação das reações químicas que levam a mistura reagente a atingir a ignição térmica. A relação entre o atraso de ignição e o campo de temperatura é ainda complicada pela existência de ignição em dois estágios e região de coeficiente negativo de temperatura, características típicas dos combustíveis automotivos que serão examinadas nas seções posteriores.

Os efeitos combinados de interação entre cinética química e campo térmico na câmara de combustão influenciam a taxa de aumento de pressão e, portanto, o controle da operação em toda a faixa de rotação. A taxa de aumento de pressão ou PRR (*Pressure Rise Rate*) é o principal fator limitante da combustão em modo HCCI. As condições na câmara de combustão devem ser tais que a combustão se desenvolva de forma suave, tal qual uma chama de deflagração, para que o PRR mantenha-se em valores aceitáveis. Caso contrário o resultado é um processo extremamente rápido que resulta em ondas de pressão dentro do cilindro causando danos ao motor (SJÖBERG; DEC, 2005).

Além dessas dificuldades, outro desafio na utilização de HCCI é o controle das emissões de monóxido de carbono e hidrocarbonetos não queimados. Comparativamente, as emissões em HCCI são maiores que nos modos SI e CI, devido às menores temperatura e tempo de residência durante combustão. Alguns autores referem-se ao modo HCCI como um processo para ser utilizado somente em baixas cargas, pois essas seriam as condições ideais para a combustão de mistura diluída (ACEVES *et al.*, 2001). Outros autores enfocam em estender a operação em HCCI para cargas altas com intuito de atingir maiores eficiências térmicas. Nesses casos, os autores consideram que as emissões podem ser abatidas usando métodos catalíticos pós-combustão (SJÖBERG; DEC; CERNANSKY, 2005).

1.1 OBJETIVOS

Esse trabalho tem por objetivo analisar, via simulação numérica, o efeito das variações espaciais na temperatura da mistura no desenvolvimento da pressão na câmara de combustão e na tendência para detonação em motores operando em modo HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*). Os resultados obtidos visam contribuir para a especificação de condições que permitam estender a operação estável da combustão para cargas altas.

Para atingir esse objetivo, são metas desse trabalho:

1. Desenvolver um modelo de estratificação térmica na câmara de combustão que mantenha constante a energia total contida na mistura ar-combustível, de forma a evidenciar o efeito de gradientes de temperatura na carga independentemente dos efeitos de pré-aquecimento da carga;
2. Obter da literatura as condições prevalentes na operação típica em modo HCCI, incluindo as condições típicas de estratificação térmica observadas em aplicações em baixa, média e alta carga;
3. Simular numericamente as diferentes condições na câmara de combustão em mistura pobre empregando iso-octano como modelo de combustível e um mecanismo de cinética química detalhada no método multizonas;
4. Estabelecer um parâmetro global indicativo da tendência à detonação que possa ser calculado a partir do desenvolvimento transiente da pressão no interior da câmara de combustão;
5. Analisar comparativamente os valores de taxa de crescimento da combustão e tendência à detonação para as várias condições simuladas;
6. Estabelecer conclusões gerais sobre os efeitos da estratificação térmica e o seu uso como estratégia de controle em altas cargas.

1.2 ORGANIZAÇÃO DO TEXTO

O capítulo 2, se apresenta a revisão bibliográfica das principais características da operação em modo HCCI, bem como os parâmetros para análise de desempenho e os principais desafios nesse desenvolvimento. No capítulo 3 são identificados formalmente os parâmetros de análise e os métodos computacionais que serão utilizados. No capítulo 4 apresenta-se e discute-se os resultados obtidos. Finalmente, no capítulo 5 se apresentam as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A combustão em modo HCCI tem sido analisada experimentalmente e por simulação numérica visando examinar especialmente estratégias de controle de carga e formação de emissões. Existem várias estratégias de controle, tais como, tempo de abertura e fechamento de válvula, uso de EGR (*Exhaust Gas Recirculation*), controle da reatividade da mistura através do uso de misturas de combustíveis, estratificação de temperatura e múltiplas injeções. A seguir, esses aspectos são revisadas através da análise da literatura (NG KIAT; CHARALAMBIDES, cap. 4, 2013), (KOMNINOS, 2015).

2.1 COMBUSTÃO EM HCCI

Apesar dos motores HCCI serem definidos como motores de combustão homogênea, a homogeneidade da combustão não é atingida devido às variações espaciais no estado termodinâmico da mistura reagente. A formação de camadas limites e as limitações na mistura turbulenta resulta em gradientes de temperatura que produzem uma estratificação térmica na mistura reagente. A ignição térmica inicia-se nos locais com temperaturas mais elevadas. Uma vez que a combustão inicia-se em um volume de fluido, o aumento de pressão resultante apressa a ignição das regiões com temperatura ligeiramente menores, causando uma propagação da combustão de forma desordenada, das zonas de maior temperatura em direção às de menor. A propagação pode acontecer em velocidades da ordem da velocidade do som, conduzindo à formação de ondas de pressão, ou em velocidades baixas (porém, mais altas que as chamadas de deflagração) desenvolvendo uma sequência de ignição mais suave que pode ser definida como uma velocidade de deflagração da autoignição (BRADLEY; *et al.*, 2002).

Com o aumento da rotação, a manutenção da velocidade de propagação da ignição em níveis que não causem danos às partes mecânicas do motor requer que a mistura ar combustível seja altamente diluída, ou seja, trabalhando com razões de equivalência da ordem de 0,45, ou através do uso de altas razões de EGR. Por causa da alta diluição, em condições ideais, o resultado da combustão seriam produtos com baixa emissão de NO₂ devido à baixa temperatura e, como existiria uma pré-mistura do combustível, não haveria a formação de fuligem. O diagrama na Figura 2.1 ilustra as regiões no diagrama razão de equivalência versus temperatura onde existe a formação de fuligem e a formação de NO₂. No mesmo diagrama são mostradas as condições que

prevalecem na combustão em motores de ignição por centelha, diesel convencionais e de combustão em baixa temperatura (LTC - *Low Temperature Combustion*) e HCCI. A trajetória executada pela mistura ar-combustível no modo HCCI fica fora das regiões de formação de NO_2 e fuligem. Em contrapartida, nota-se a estreita área que ele ocupa no diagrama, o que causa a grande dificuldade em implementar esse tipo de combustão para aplicações práticas, as quais exigem alta robustez de controle da combustão em uma ampla faixa de condições de operação (DEC, 2009).

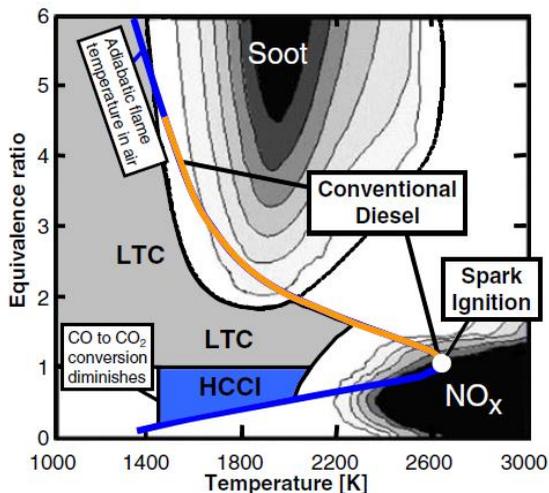


Figura 2.1 - Diagrama mostrando as regiões onde ocorrem os tipos de combustão SI, CI, LTC e HCCI.

Fonte: Dec (2009)

A restrita faixa em que opera o HCCI leva à necessidade de um controle apurado das variáveis envolvidas na combustão. Assim, segundo Dec (2009), existem quatro principais desafios técnicos que devem ser resolvidos antes que o HCCI possa ser aplicado em motores para transporte:

1. Melhorar a eficiência da combustão em baixa carga;
2. Estender a operação para altas cargas;
3. Entender os efeitos da composição do combustível nas condições de operação;
4. Controlar o CA50, ou seja, o ângulo do virabrequim onde 50% da energia do combustível foi liberada ou *combustion-phasing*,

sobre uma ampla faixa de carga e rotações e nas condições transientes que os motores são submetidos. A seguir, essas condições são discutidas.

2.1.1 Taxa de aumento da pressão (PRR)

A utilização do processo de combustão HCCI para altas cargas é limitada pela taxa de aumento de pressão. Taxas de aumento de pressão elevadas podem resultar na formação de ondas de pressão dentro da câmara de combustão, as quais, quando severas, podem resultar em danos na estrutura do motor. Esse fenômeno é ilustrado na Figura 2.2. A Figura 2.2(a) mostra a comparação entre várias curvas de pressão medidas na câmara de combustão de motor operando em HCCI e prevista pelo software ChemKin®, considerando uma câmara de combustão em condições homogêneas, em diferentes relações de equivalência, com a manutenção do CA50 no TDC (*Top Dead Center*). Na Figura 2.2(b) mostra-se os valores máximos de taxa de aumento de pressão (PRR) medidos no motor e previstos pelas simulações no ChemKin®, em função da razão de equivalência. Os valores correspondem a um motor operando em 1200 rpm e utilizando iso-octano como combustível.

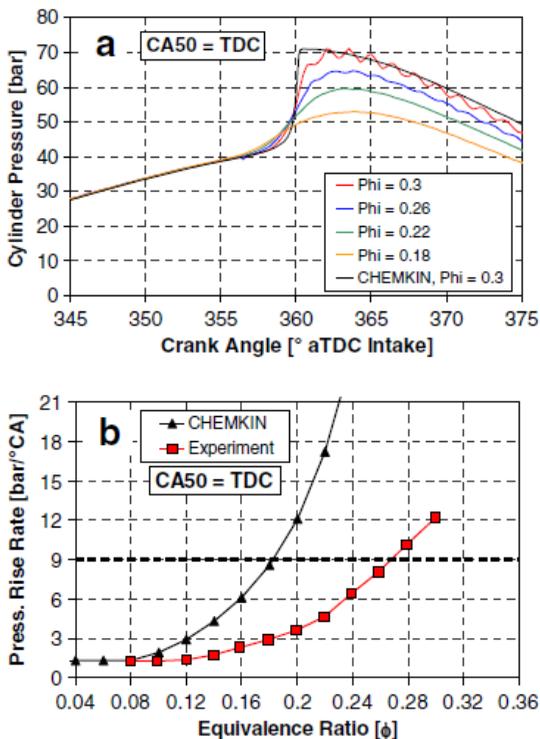


Figura 2.2 - Resultados experimentais da pressão medida no cilindro comparados com simulações realizadas no software Chemkin. (a) Curvas de pressão transientes medidas no experimento e previstas no ChemKin. (b) Valores máximos de PRR obtidos nos experimentos e das simulações com ChemKin. Motor operando em 1200 rpm, CA50=TDC e utilizando iso-octano. Fonte: Dec (2009)

Observa-se na Figura 2.2(b) que a partir de um valor de razão de equivalência igual 0,27, o PRR medido atinge o valor 9 $\text{bar}/^{\circ}\text{CA}$. Na Figura 2.2(a) observa-se que a curva de pressão nessa condição passa a exibir oscilações que são típicas da reverberação de ondas de pressão no interior da câmara de combustão. Assim, nesses experimentos, o valor 9 $\text{bar}/^{\circ}\text{CA}$ é tido como um valor limite separando a operação normal daquela na qual pode levar a ocorrência de oscilações da pressão. A simulação no ChemKin® considerando que a combustão ocorre em condições homogêneas prevê valores maiores de PRR do que os valores

medidos, evidenciando que a hipótese de carga térmica completamente homogênea não modela corretamente o estado físico da câmara de combustão. Os autores associam a maior variação do PRR com a razão de equivalência obtida das medições com a estratificação térmica que acontece dentro do cilindro. A estratificação térmica em motores com baixa recirculação de gases da combustão, como no caso da Figura 2.2, é principalmente causada pela transferência de calor para a parede e pela turbulência no fluido durante a compressão. Nesses motores, forma-se um gradiente contínuo das paredes para o interior da carga.

A literatura reconhece um segundo tipo de estratificação. Para motores operando com valores elevados de recirculação de gases residuais, pode ocorrer uma mistura incompleta entre a nova mistura admitida no motor e os gases queimados, contribuindo para uma estratificação térmica fragmentada na câmara de combustão. Como resultado da estratificação térmica, a combustão não ocorre simultaneamente em todas as partes da câmara de combustão como é evidenciado nas imagens de quimiluminescência da Figura 2.3. A Figura 2.3(a) apresenta a imagem tomada do topo da câmara, enquanto que a Figura 2.3(b) mostra a imagem tomada na lateral da câmara. O combustível utilizado foi o iso-octano, com o motor operando a 1200 rpm, razão de equivalência 0,38 e $CA50 = 368^\circ$. Os pontos luminosos mostram as regiões onde a combustão é mais intensa. A combustão começa nas zonas mais quentes, seguindo para as regiões com temperaturas próximas e assim subsequentemente. Como a variação de temperatura para motores com alta quantidade de gases residuais não é contínua, a combustão se dá de forma mais dispersa, resultando no aspecto granuloso observado nas imagens.

Desses dois casos analisados verifica-se o forte efeito da estratificação térmica em amortecer a velocidade com que as ignições térmicas ocorrem na câmara de combustão e a dificuldade de modelar esses efeitos em simulações simplificadas.

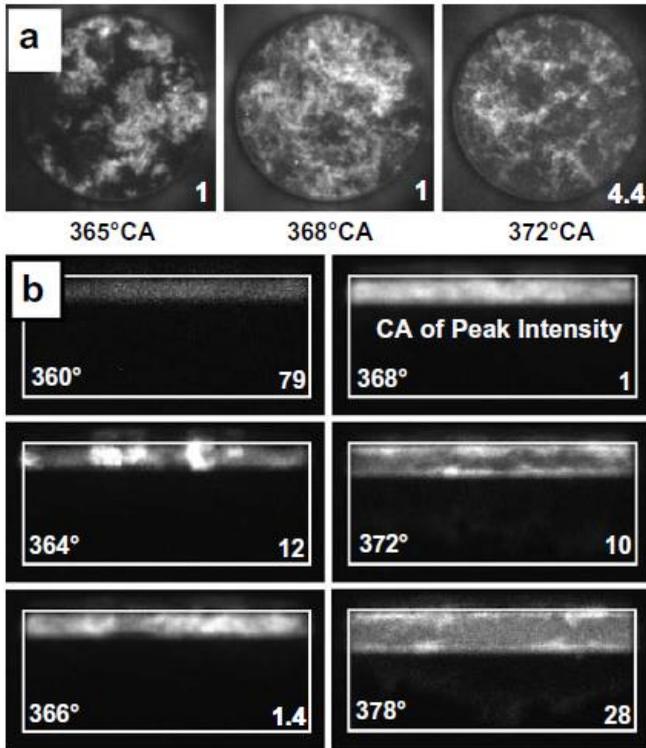


Figura 2.3 - Imagens de quimiluminescência da ignição em um motor HCCI operando com grande quantidade de gases residuais.

(a) Imagem tomada do topo da câmara. (b) Imagem tomada na lateral da câmara. Combustível: iso-octano, 1200 rpm, $\phi=0,38$,

CA50=368°. Os números ao lado direito inferior das figuras representam a intensidade luminosa para captura da imagem pela câmera usada no trabalho.

Fonte: Dec (2009)

2.1.2 Estratificação térmica

Nas primeiras pesquisas realizadas em HCCI, no final da década de 90 e início dos anos 2000, pensava-se que a camada limite térmica formada pelo conjunto pistão, anéis, cabeçote, válvulas e parede desempenhava um papel fundamental na estratificação térmica. Porém os últimos estudos, realizados por pesquisadores a partir de 2004,

identificaram a maior dependência em relação a estratificação não tão intensa presente no núcleo do cilindro. Isto pode ser visto na imagem da Figura 2.3(a) e mais evidente na imagem lateral da Figura 2.3(b). É aparente que em 364°CA (*Crank Angle*) a ignição começa na região central mais quente, e rapidamente se estende às outras regiões quando é atingido 368°CA . Verifica-se que nesse momento a combustão ainda não atingiu a região próxima à parede. O autor evidencia que a combustão atinge a camada limite somente em 370°CA . Em 372°CA a quimiluminescência indica que a combustão na região central terminou e se propagou para a camada limite. Assim, desde que a maior parte da combustão ocorreu na parte central do cilindro e o máximo PRR foi atingido em $367,75^{\circ}\text{CA}$, concluiu-se que a estratificação térmica no interior do cilindro desempenha a principal função no controle do máximo PRR e consequentemente no controle da detonação.

Desde que o máximo PRR é controlado pela intensidade de estratificação térmica, muitos pesquisadores tem explorado vários métodos para aumentá-la com o objetivo de estender os limites do HCCI.

Sjöberg, Dec e Babajimpoulos (2004) tentaram influenciar a temperatura interna por meio do resfriamento intenso das paredes do cilindro. Inicialmente, o motor de teste foi estabilizado na operação com a água de resfriamento a 373 K. Então, essa teve a sua temperatura reduzida bruscamente em 50 K e os efeitos foram observados. O resultado mostrou que a variação de temperatura foi sentida apenas na camada limite e que a profundidade de penetração do efeito térmico, ou seja, a espessura térmica, aumentou muito pouco, não afetando a região de interesse para controle da combustão.

Com isso, os pesquisadores passaram a usar técnicas com o objetivo de influenciar a temperatura interna do gás, como, por exemplo, através do controle da temperatura do ar na admissão. Alternativamente, tem sido aplicadas estratégias de mistura incompleta do ar de admissão com os gases residuais, com intuito de aumentar a estratificação térmica. Essas tem se mostrados as técnicas mais efetivas até o momento.

Conforme citado nos parágrafos acima, o mecanismo de combustão em HCCI ocorre como uma sequência de reações que acontecem localmente na câmara de combustão. Esse controle pode ser atingido através da configuração da distribuição de temperatura e massa. Komninos (2015) analisou algumas dessas condições, conforme ilustrado na Figura 2.4.

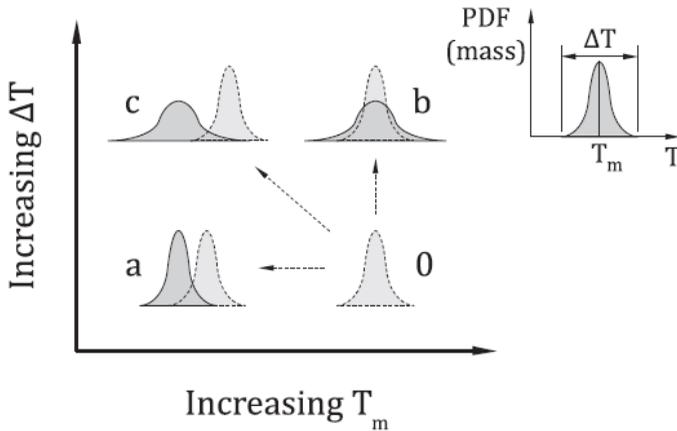


Figura 2.4 - Relações entre espessura térmica e temperatura média.
Fonte: Komninis (2015)

Uma taxa de combustão baixa pode ser atingida diminuindo as temperaturas locais na câmara, aumentando assim a variância da distribuição massa-temperatura. Nesse primeiro caso o objetivo é reduzir a temperatura média do gás T_m , mantendo a espessura térmica ΔT . Isso corresponde ao processo 0-a na Figura 2.4, que conduz à reações mais lentas, retardando as ignições e resultando em uma combustão mais lenta. Por outro lado, se a temperatura média do gás é mantida, e a espessura térmica é aumentada, como no processo 0-b, a ignição vai ser avançada desde que a distribuição se estenda para altas temperaturas. O controle da ignição não é um efeito dominante, pois a taxa de queima esperada é baixa devido à variabilidade da temperatura, conduzindo a um processo assíncrono dentro da câmara de combustão. Finalmente, se a temperatura média é diminuída e a variância da temperatura é aumentada, processo 0-c, a ignição térmica começará atrasada e a taxa de combustão diminuirá. Estas relações são de importância fundamental para o desenvolvimento do trabalho nas seções seguintes.

2.1.3 Atraso da Combustão

Os estudos realizados sobre a estratificação térmica provaram a grande dependência dos tempos característicos da combustão com o gradiente espacial de temperatura, evidenciados pelo atraso de ignição e PRR. Assim, pesquisadores buscaram controlar o momento onde ocorre

o CA50 através do controle da temperatura de entrada da mistura ar-combustível (SJÖBERG, DEC E CERNANSKY, 2005), (SJÖBERG; DEC, 2005). Com o controle do atraso de combustão foi possível estender a operação do motor da Figura 2.3(a) para cargas relativamente altas, com razão de equivalência acima de 0,3. A Figura 2.5 mostra a intensidade do efeito do controle de temperatura sobre a velocidade de combustão dentro do cilindro. As linhas contínuas representam as medições experimentais de pressão na câmara de combustão e as linhas que apresentam oscilações são os resultados obtidos de simulações empregando ChemKin®. O combustível utilizado foi o iso-octano, com o motor operando a 1200 rpm. Nas simulações, a espessura do gradiente térmico (TW - *Temperature Width*) foi fixada em 20 K. T_{bdc} (BDC - *Bottom Dead Center*) mostrado, é a temperatura na câmara de combustão medida na zona central em um modelo multizona no ponto morto inferior (SJÖBERG, DEC E CERNANSKY, 2005).

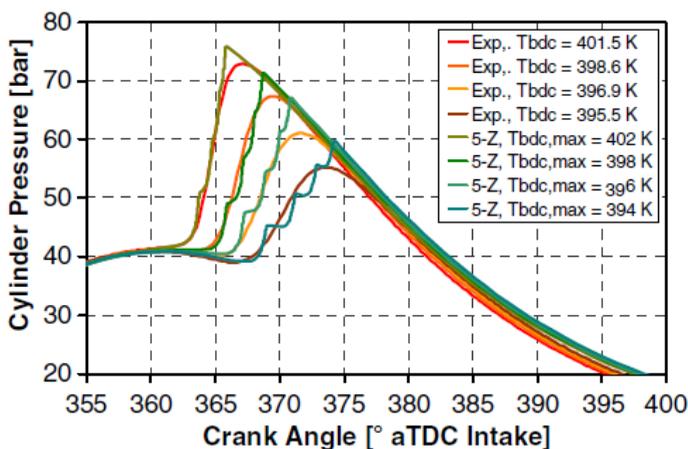


Figura 2.5 - Atraso da combustão. Modelo numérico comparado com modelo experimental. Iso-octano, 1200 rpm, $\phi = 0,38$, TW=20K.

Fonte: Sjöberg, Dec e Cernansky (2005)

Com o aumento da temperatura de admissão, evidenciada pelo aumento no T_{bdc}, o atraso de ignição é reduzido significativamente. Quando a temperatura no ponto morto inferior é 402 K, o CA50 situa-se em 365°. Com a redução da temperatura para 394 K, o CA50 passa para 371°. Como consequência, o PRR pode ser diminuído de 14 bar/°CA para

4,7 bar/°CA. Observa-se que quando se assume o controle da temperatura da mistura, atrasa-se o momento da ignição. Com a conseqüente expansão dos gases em combustão que ocorre após o TDC, a mistura é esfriada, causando uma redução na velocidade das reações e suavizando o acréscimo da pressão. Essas conclusões estimularam a possibilidade de usar razões de equivalência mais altas em HCCI sem resultar em oscilações na pressão.

Embora seja comprovada a eficácia no controle do momento da combustão pela temperatura, ela é limitada pela dificuldade de se manter estável ciclo à ciclo o momento exato em que se deseja a combustão e também pela ocorrência de falha de ignição. A operação em carga alta leva à necessidade de um atraso excessivo da ignição. Com isso, a combustão ocorre tardiamente, o movimento do pistão resfria a mistura, causando a redução da velocidade das reações e ocorrência de extinção (SJÖBERG; DEC; CERNANSKY, 2005), (SJÖBERG; DEC, 2005).

2.1.4 Recirculação de gases de exaustão (EGR)

A recirculação de gases queimados é usada como uma forma eficiente de reduzir a formação de óxidos nítricos em grande parte da frota de motores diesel, pois a diluição com os produtos saturados de combustão, CO₂ e H₂O, aumenta o calor específico médio da mistura resultando em diminuição na temperatura da chama.

O EGR também é usado como método de controle da ignição e da taxa de queima em HCCI. Um primeiro efeito é o pré aquecimento da mistura, o que facilita a ignição. Um segundo efeito é a redução na concentração de oxigênio, um efeito que dificulta a ignição. O terceiro efeito, é o aumento do calor específico médio, reduzindo a elevação da temperatura da mistura (ZHENG; READER; HAWLEY, 2004) (LÜ; CHEN; HUANG, 2005).

A intensidade dos efeitos citados acima dependerá do processo utilizado para inserir o EGR. Existem dois processos tipicamente usados em motores. O primeiro é conhecido como EGR interno, o qual mantém-se uma parcela dos gases remanescentes da combustão dentro do cilindro durante a transição do tempo de exaustão e admissão através do *overlap* da válvula. O segundo processo é denominado como EGR externo, em que os gases resultantes da combustão são retirados do conduto de exaustão, resfriados e inseridos novamente como parte da mistura ar-combustível.

O EGR interno pode ser controlado de duas formas, conforme o esquema da Figura 2.6. A primeira forma, ilustrada na Figura 2.6 (a),

consiste em utilizar um *overlap*, ou seja, manter as válvulas de admissão e de exaustão simultaneamente abertas, com o intuito de aproveitar a inércia dos gases ao final da exaustão para enviar uma parcela dos gases queimados na direção do conduto de admissão, sendo útil especialmente em motores aspirados naturalmente. A segunda forma, ilustrada na Figura 2.6 (b), é chamada de *overlap* negativo (NVO - *Negative Valve Overlap*), também conhecido como método de re-compressão de gases de exaustão. Observa-se na figura que a válvula de exaustão volta à sua sede antes que o pistão chegue ao TDC e a válvula de admissão só abrirá alguns graus depois do TDC. Dessa forma, os gases de exaustão, ainda em relativa alta pressão, ficam aprisionados até a abertura da válvula de admissão. Então, eles sofrem expansão na direção do conduto de admissão e são novamente admitidos junto com a mistura reagente. Essas configurações ainda podem apresentar geometrias simétricas e assimétricas (SCHRANN, 2014).

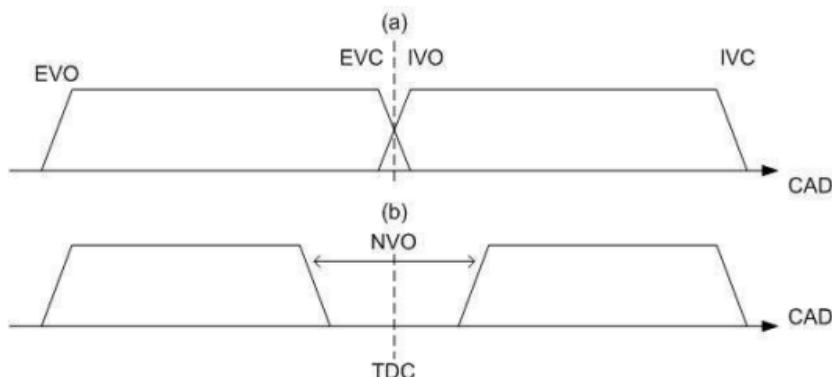


Figura 2.6 - Comparação entre os dois exemplos de técnicas de implementação de EGR interno. As siglas representam: EVO (*Exhaust Valve Opened*), EVC (*Exhaust Valve Closed*), IVO (*Intake Valve Opened*), IVC (*Intake Valve Closed*) e CAD (*Crank Angle Degree*).

Fonte: Schrann (2014)

Zheng, Reader e Hawley (2004) compararam os dois processos de EGR, ainda, variando o espaçamento angular entre os came de comando de válvula configurado como NVO. Os resultados mostraram que o EGR interno forma uma mistura quente e, como consequência, ocorreram ignições com relativo avanço, o que não é benéfico para o aumento da faixa de trabalho dos HCCI. Ao contrário, o método com

EGR externo mostrou-se mais eficaz, já que trabalhando com uma mistura mais fria, pode-se atrasar a ignição e diminuir a velocidade de aumento da pressão. Além disso, esse método mostrou experimentalmente uma redução nos níveis de emissão NO_x e uma diminuição drástica nos níveis de emissão de fuligem, já que a mistura tende a ser homogênea, não formando regiões com concentração rica em combustível. Além disso, o aumento do uso de EGR externo fez crescer os níveis de CO devido ao fato de que a combustão tornou-se progressivamente incompleta, um resultado da temperatura mais baixa na câmara de combustão.

2.1.5 Ondas de Pressão

As ondas de pressão que podem ocorrer dentro de motores operando em HCCI possuem características específicas que as diferem do *Knock* que ocorre em motores SI, porém, da mesma forma, quando severas, são fontes causadoras de danos à estrutura física da máquina. Os danos são originados da absorção da energia da onda pela estrutura. Quando uma onda de pressão atinge a parede do cilindro, uma parte é refletida retornando ao sistema, e a outra é absorvida pela estrutura do motor. A energia absorvida pode resultar em vibrações, que pode ser dissipada na forma de calor caso haja amortecimento. As vibrações que não forem absorvidas pelo material, atravessam a estrutura e são transmitidas como ondas sonoras. Além disso, para que o pulso da onda incidente se transforme em vibração interna, algumas frequências do espectro da onda devem estar perto da frequência natural da estrutura. Eng (2002) estudou a ocorrência de ondas de pressão dentro da câmara de combustão comparando a combustão em SI e HCCI para alta carga. Como era já conhecido de trabalhos anteriores, a amplitude dos pulsos de pressão em HCCI eram muito maiores quando comparadas as amplitudes no motor SI quando tomado como parâmetro o nível de ruído que emergia da estrutura do motor.

Com essas diferenças identificadas, foram analisados quantitativamente as diferenças entre os espectros de pressão no HCCI e no SI. A principal característica observada no espectro de frequência do HCCI é que uma fração muito maior de energia está contida em baixas frequências (de 4 à 8 kHz) que corresponde ao primeiro modo de vibração. Além disso, foi mostrado que a maior parte da energia na detonação em SI está contida em modos de frequência mais elevada quando comparados ao HCCI, conforme mostrado na Figura 2.7.

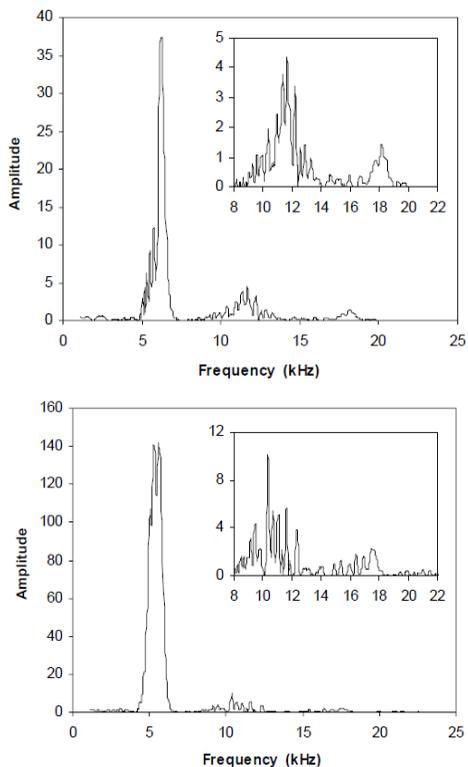


Figura 2.7 - Espectro de frequência para amplitude da pressão.
Lado esquerdo, espectro de frequência para detonação em SI.
Lado direito, espectro de frequência para HCCI.
Fonte: Eng (2002)

Os resultados acima foram complementados com o espectro de frequência para o bloco do motor medido com uso de acelerômetro, conforme mostrado na Figura 2.8.

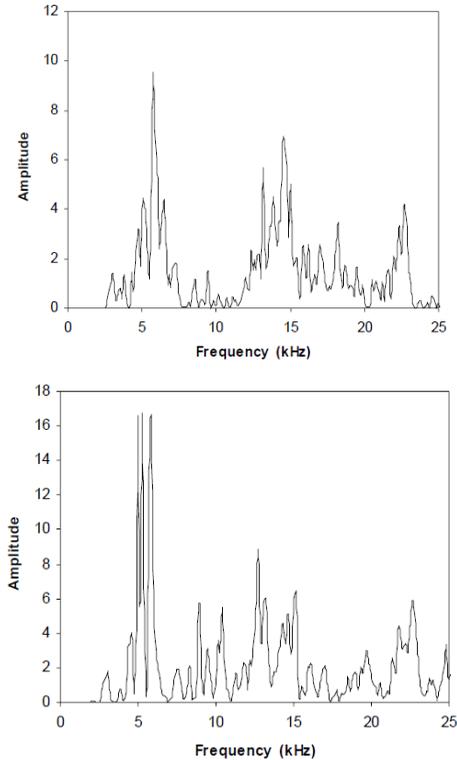


Figura 2.8 - Espectro de frequência para amplitude de vibração do bloco do motor. Lado esquerdo, espectro de frequência para detonação em SI. Lado direito, espectro de frequência para HCCI. Fonte: Eng (2002)

Na condição de operação em SI a energia contida no espectro de vibração entre 15 e 20 kHz é 1,5 vezes maior que a contida de 4 à 8 kHz. Para a operação em HCCI, apesar do maior pico de amplitude acontecer no primeiro modo de vibração, a maior parte da energia está contida em modos maiores acima de 8 kHz. Portanto, o bloco do motor atenua a energia contida no primeiro modo de vibração.

Através desses resultados concluiu-se que a taxa de crescimento de pressão em HCCI é mais elevada do que em SI e as frequências dos ruídos transmitidos é diferente. Assim, é necessário determinar um novo parâmetro para detectar os limites de amplitude de pressão que podem levar danos ao motor. O parâmetro RI, ou *Ring Intensity*, será usado

como critério para a avaliação da tendência à isso, conforme será detalhado na seção 3.2.2.

2.2 COMPORTAMENTO DOS COMBUSTÍVEIS EM AUTOIGNIÇÃO

A autoignição é definida como um fenômeno em que a oxidação do combustível se dá sem a necessidade de um mecanismo externo para inserir energia no sistema e proporcionar a energia de ativação necessária. As propriedades de autoignição dos hidrocarbonetos dependem fortemente da estrutura da molécula de combustível. A Figura 2.9 reproduz um resultado clássico (Heywood, 1988) que mostra a taxa de compressão mínima necessária em um motor a combustão interna para que ocorra a autoignição de uma mistura estequiométrica de ar e combustível alimentada nas condições padrões de 101 kPa e 298 K em função do número de átomos de carbono na molécula de combustível. Essa taxa de compressão mínima é denominada de taxa de compressão crítica. Em geral, a taxa de compressão crítica não depende apenas do número de átomos de carbono. Hidrocarbonetos lineares entram em ignição em taxas de compressão menores que hidrocarbonetos ramificados, cíclicos e aromáticos, mesmo possuindo o mesmo número de átomos de carbono.

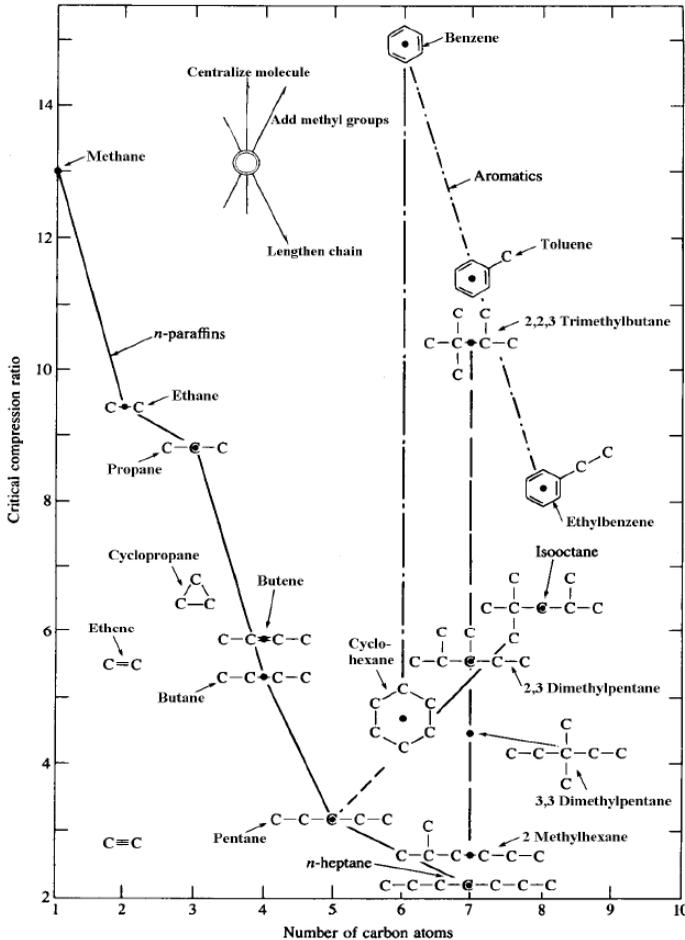


Figura 2.9 - Taxa de compressão crítica para a auto ignição de hidrocarbonetos.

Fonte: Heywood (1988, p. 472)

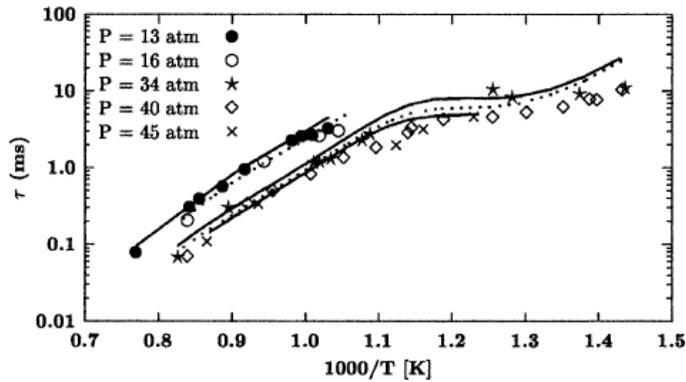
Adaptado: Wijngaarden (2008, p. 36)

Alcanos normais, como o n-heptano, entram em ignição em menores temperaturas do que os demais alcanos com o mesmo número de carbonos. Essa propriedade é resultado de sua estrutura aberta contendo apenas ligações saturadas, resultando em um fator de forma de colisão (*stearic factor*) próximo a 1, o que implica que não existem direções preferenciais de colisão para a degradação da molécula de combustível. Dessa forma, n-alcanos possuem um tempo de atraso de ignição

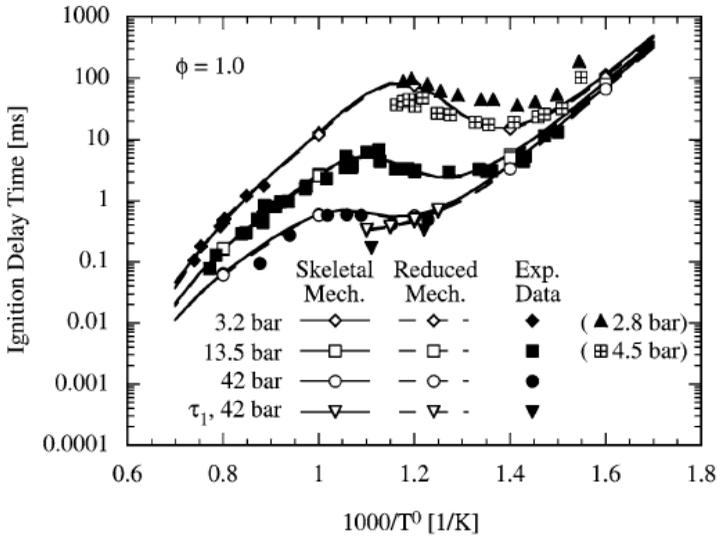
relativamente reduzido em toda a faixa de temperatura. Por outro lado, os alcanos ramificados, como o iso-octano (ou 2,2,4 trimetilpentano), apresentam direções preferenciais de colisão, ou seja, fator de forma de colisão relativamente muito menor que os alcanos normais, e portanto, maior atraso de ignição (WIJNGAARDEN, 2008, p. 32-36).

A forma atual de entendimento da autoignição é baseada na discussão dos caminhos de reação principais relacionados com o atraso de ignição (IDT - *Ignition Delay Time*) medido em tubo de choque (ST) ou em máquina de compressão rápida (RCM). A Figura 2.10 apresenta um resultado típico da autoignição de uma mistura de iso-octano/ar, com razão de equivalência combustível/ar de 0,4, pressão de 4,16 MPa e temperatura de 827 K, realizado em uma máquina de compressão rápida (TANAKA *et al.*, 2003). Nesse experimento, utilizando um pistão que se move em alta velocidade e atinge um batente de fim de curso, a mistura ar-combustível é comprimida em uma situação de volume constante. A temperatura e pressão iniciais eram de 318 K e 0,1 MPa, respectivamente. Ao final da compressão, a pressão da mistura atinge o valor de 4,16 MPa. Cálculos de compressão isentrópica indicam que nesse momento a temperatura da mistura é 827 K, como mostra a escala mais à esquerda. Então, após um tempo de indução (IDT) de aproximadamente 11 ms a pressão torna a subir abruptamente. Essa elevação de pressão é resultado da ignição térmica da mistura. Portanto, o atraso de ignição para essas condições é de 11 ms.

(propano), a partir de C4 (butano) os hidrocarbonetos apresentam uma inflexão na curva de IDT versus $1/T$, como na curva mostrada na Figura 2.11 para o iso-octano. A Figura 2.11(a) mostra que em pressões acima de 30 atm o iso-octano apresenta uma leve região de NTC. Na região de NTC, o acréscimo da temperatura é acompanhado por um crescimento do atraso de ignição, como para o n-heptano mostrado na Figura 2.11(b), ou, pelo menos, como no caso do iso-octano, nessa região o atraso de ignição é pouco sensível à temperatura. No caso do iso-octano, esse efeito não existe em baixa pressão. A existência do NTC leva à ignição em baixa temperatura em sistemas de combustão, dando origem ao que se denomina de chama fria.



(a)



(b)

Figura 2.11 - Curva de atraso de ignição versus inverso da temperatura medida (pontos) e prevista (linhas) para a oxidação de (a) iso-octano com ar em tubo de choque (medições de Fieweger, Blumenthal e Adomeit, 1994, 1997), na composição estequiométrica, para diferentes pressões (CURRAN *et al.*, 2002) e (b) n-heptano com ar medido em tubo de choque (altas pressões) (CIEZKI e ADOMEIT, 1993) e máquina de compressão rápida (baixas pressões) (MINETTI *et al.*, 1995) na composição estequiométrica, para diferentes pressões (LIU *et al.*, 2004).

Outra característica observada em estudos de atraso de ignição é a ocorrência de dois estágios de ignição, chamados de LTHR (*Low Temperature Heat Release*) e HTHR (*High Temperature Heat Release*) na literatura de HCCI. Esse fenômeno não é observado para iso-octano, mas ocorre para n-heptano, como observado na Figura 2.12. Na medição mostrada, em Davies (2015), ocorre a ignição de primeiro estágio em aproximadamente 10 ms e a ignição de segundo estágio em aproximadamente 27 ms. A curva em vermelho representa a medição observada quando o teste é realizado com uma mistura inerte. A queda de pressão observada é típica dos experimentos com RCM e decorre de transferência de calor para as paredes da máquina.

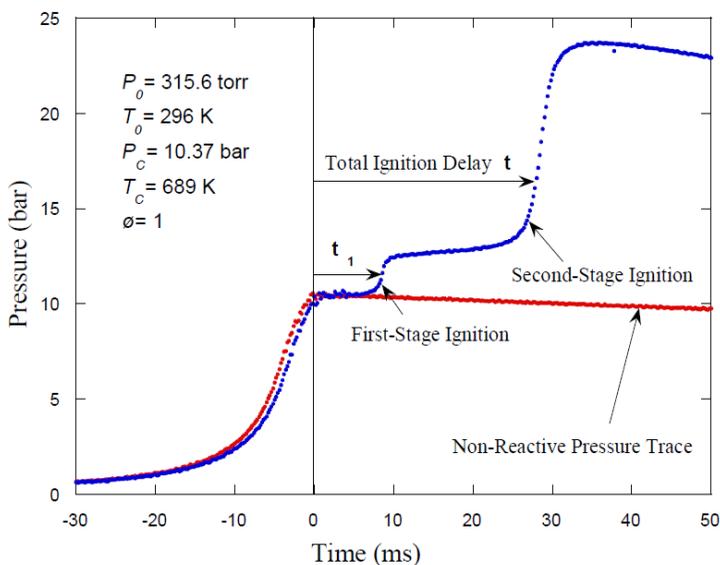


Figura 2.12 - Medição de pressão durante a ignição em máquina de compressão rápida de uma mistura de n-heptano/ar, com razão de equivalência combustível/ar de 1, pressão de 10,4 bar e temperatura de 689 K, realizado em uma máquina de compressão rápida.

Fonte: Davies (2015).

A Figura 2.13 mostra o mesmo comportamento no contexto da combustão em motores que operam com HCCI. Os alcanos que possuem esta propriedade começam a reagir até atingirem uma temperatura característica, abaixo dos 900 K, em que a taxa de reação cresce,

chegando ao pico no primeiro estágio de ignição, e então decai, em decorrência da região de NTC. Com o aumento da temperatura, o segundo estágio de ignição ocorre liberando uma grande quantidade de calor concluindo a ignição térmica da mistura.

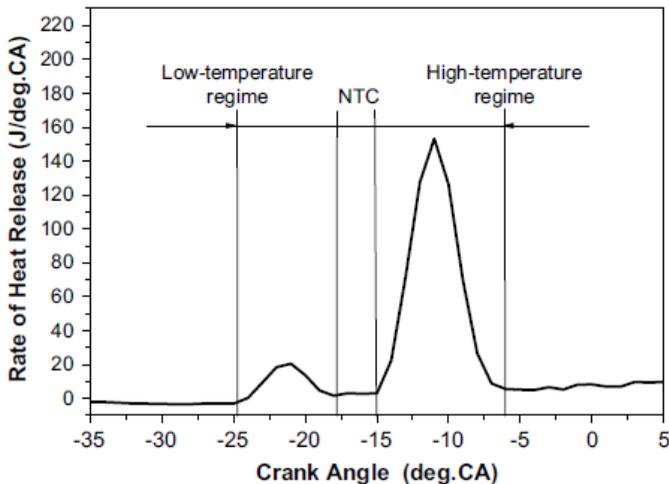


Figura 2.13 - Calor liberado da combustão de um motor HCCI operando com n-heptano.

Fonte: Yao, Zheng e Liu (2009)

Lü, Chen e Huang (2005) realizaram um estudo experimental sobre o comportamento da reação aumentando progressivamente o número de octanos do combustível através das misturas de n-heptano e iso-octano. Assim, o experimento foi realizado com n-heptano inicialmente puro, seguido de 25, 50, 75 e 90%, correspondente à RON00, RON25, RON50, RON75 e RON90 respectivamente (RON - *Research Octane Number*). Os resultados são mostrados na Figura 2.14. Inicialmente, observa-se o grande impacto que a alteração da composição do combustível exerce sobre os parâmetros da combustão. Os efeitos de dois estágios de ignição e NTC são percebidos para o combustível com baixo número de octanos, o que influi diretamente nas características do momento em que a ignição ocorre, a duração do processo de combustão e a máxima pressão atingida.

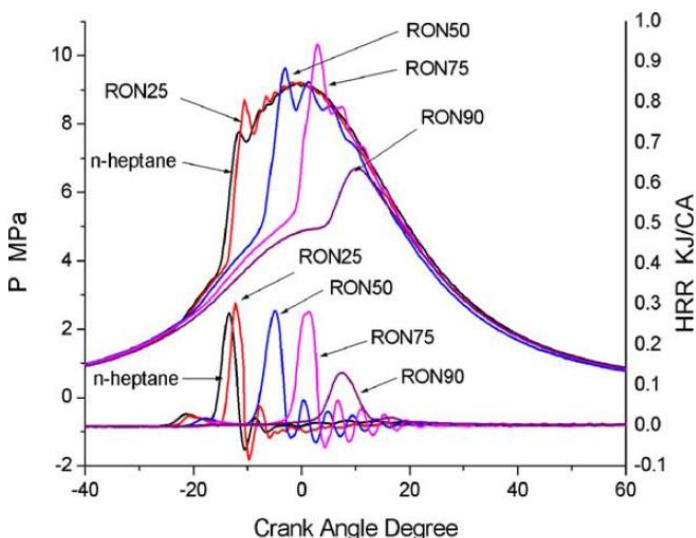


Figura 2.14 - Curvas de pressão e calor liberado para combustíveis com diferentes RON's para mesma razão de equivalência.

Fonte: Lü, Chen e Huang (2005).

Uma das consequências que mais influenciam a combustão é a presença de forma mais intensa da chama fria em combustíveis com número de octanos reduzido. Primeiramente, a chama fria inicia o processo de reação consumindo o combustível e a reação entra em um estágio de cinética lenta. Apesar disso, a medida que as reações de isomerização desse estágio continuam, temperatura e pressão também aumentam progressivamente na câmara de combustão. Ocorre um acúmulo de H_2O_2 até que em aproximadamente 1.000 K, ocorre a explosão na formação de radicais OH e o segundo estágio de ignição ocorre. O início prematuro da combustão para casos com RON abaixo de 90 leva ao aumento prematuro da pressão e temperatura antes mesmo do tempo de compressão terminar, ocasionando picos e taxas de pressão extremamente elevados.

A Figura 2.15 identifica o tempo de duração da combustão em relação à razão de equivalência. Nota-se que para uma mesma razão de equivalência a duração da combustão utilizando combustíveis com maior número de octanos é maior, um resultado da menor importância do primeiro estágio de ignição.

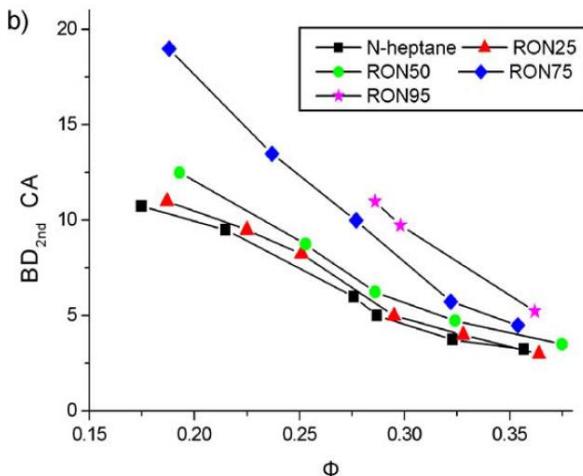


Figura 2.15 - Duração da combustão do segundo estágio de ignição (BD_{2nd}) em relação ao grau do virabrequim (CA) vs. razão de equivalência.

Fonte: Lü, Chen e Huang (2005).

Apesar da taxa de reação ser muito mais elevada, experimentos com misturas com pequenas frações de n-heptano resultaram em bom desempenho para os motores, já que a energia necessária para a ativação das reações foi diminuída e variações randômicas ciclo à ciclo também diminuídas com essa configuração (DEC, 2009) (LÜ; CHEN; HUANG, 2005) (YAO; ZHENG; LIU, 2009).

2.3 MÉTODOS COMPUTACIONAIS

Os primeiros métodos computacionais para estudo da combustão em HCCI, classificados como zero dimensionais, basearam-se em modelos com cinética química detalhada de um volume (*single zone*) que se tratava de um reator perfeitamente misturado com volume variável. O modelo assumia distribuição homogênea de temperatura e concentração de combustível. Essa ideia partia dos pressupostos que a turbulência era suficientemente alta para promover mistura e que a cinética química possuía o papel exclusivo no controle da combustão. Com isso, foi possível alcançar melhor compreensão dos efeitos dos mecanismos químicos detalhados e melhor interpretar as medições no desenvolvimento de HCCI. Desde a concepção do HCCI, os modelos de

mecanismos cinéticos evoluíram de forma significativa. Inicialmente, poucos mecanismos detalhados eram conhecidos, apenas para pequenos hidrocarbonetos, porém, com a intensa pesquisa foi possível desenvolver mecanismos para grandes hidrocarbonetos tais como n-heptano e iso-octano. O uso do método de uma zona com cinética química detalhada revela muito bem o atraso de ignição para os combustíveis em HCCI porém, ele demonstrou grandes dificuldades em prever a taxa de liberação de calor, a duração da combustão e o nível de emissões, principalmente, devido a consideração de homogeneidade na câmara de combustão. Como foi descrito anteriormente, as pesquisas revelaram uma grande não homogeneidade do sistema mostrando que existe uma distribuição de temperatura no núcleo do cilindro que é a principal responsável por determinar a taxa de liberação de calor e aumento de pressão. Assim, apenas criando modelos completos de cinética química não capacita os modelos numéricos a preverem com maior acurácia a combustão em HCCI (SJÖBERG; DEC; CERNANSKY, 2005).

Com intuito de solucionar as limitações do modelo de uma zona, foi criado o modelo multizonas, no qual a câmara de combustão é dividida em vários volumes, cada um representando um reator perfeitamente misturado. Cada zona possui uma temperatura e outros parâmetros são também definidos, tais como transferência de massa e calor. Essa nova concepção proporcionou um maior detalhamento da câmara de combustão, como a possibilidade de incluir os efeitos de parede do cilindro (regiões de baixas temperaturas), tais como camada limite e folgas as quais resultam na formação de hidrocarbonetos não queimados. Existem vários modelos multizonas publicados na literatura sendo estes categorizados pelo número de zonas, pelo tipo de zonas (núcleo adiabático, camada limite, folgas e zonas com transferência de massa), e tipo de interação entre zonas, (trabalho pressão-volume, transferência de calor e de massa).

2.3.1 Formulação para o modelo multizonas

Nos modelos multizonas, as características geométricas do motor e a função que determina a variação do volume da câmara de combustão com o tempo são prescritos. A simulação inicia-se no momento de fechamento da válvula de admissão e prossegue até o final da combustão.

O software ChemKin® usa o modelo multizonas como método para simular a combustão em motores HCCI. Nesse modelo, cada zona é um volume variável modelada como um reator perfeitamente misturado que não troca massa nem calor com os outros reatores. As únicas trocas

que existem são de trabalho entre zonas e de calor com as paredes da câmara de combustão. Além disso, a pressão de todas as zonas é uniforme, isto é, não existe gradiente de pressão entre zonas. A modelagem do sistema de equações é descrita a seguir, conforme CHEMKIN-PRO (2008).

A equação de conservação da massa da espécie química k aplicada para cada zona i é escrita como

$$\rho^i \frac{dY_k^i}{dt} = \dot{\omega}_k^i W_k \quad \text{para } i = 1, \dots, N_{\text{zone}} \quad (2.1)$$

onde ρ^i é a densidade da mistura que ocupa a zona i e Y_k , W_k e $\dot{\omega}_k$ são respectivamente, a fração mássica, a massa molar e a taxa de produção molar da k -ésima espécie.

A temperatura da mistura durante a ignição é modelada pela solução da equação da conservação da energia. Porém, inicialmente, precisa-se determinar o campo de temperatura antes do começo da ignição térmica. Defini-se um ângulo de transição θ_t que marca o momento em que o processo de ignição térmica inicia. Essa definição é bastante arbitrária e geralmente baseada em comparação com medições. Para determinar o campo de temperatura nos instantes que antecedem o ângulo crítico, duas estratégias são utilizadas.

A primeira estratégia consiste em aproximar o campo de temperatura como resultado de um processo de compressão isentrópica. O volume instantâneo da câmara de combustão é conhecido, porém os volumes individuais de cada zona não são. A mistura é modelada como um gás ideal e assim satisfaz a equação de estado

$$P^i V^i = m^i R T^i \sum_{k=1}^k \frac{Y_k^i}{W_k} \quad (2.2)$$

Agora, introduz-se um nova variável,

$$G^i = \sum_{i=1}^N P^i V^i \quad (2.3)$$

Lembrando que a pressão é a mesma para todas as zonas ($P^i = P$), os volumes são então determinados por

$$V^i = \frac{G^i - G^{i-1}}{P} \quad (2.4)$$

satisfazendo a restrição

$$V_{cilindro} = \sum_{i=1}^N V^i \quad (2.5)$$

A partir de um processo iterativo, o volume e temperatura de cada zona é determinado ao longo da compressão até atingir o ângulo de transição θ_t , portanto, definindo a condição inicial para o cálculo da ignição térmica.

Alternativamente, a segunda estratégia consiste no acoplamento entre uma solução de CFD e o cálculo de ignição multizonas. Quando a solução de CFD do escoamento turbulento com transferência de calor na câmara de combustão é disponível, as temperaturas das zonas são obtidas fazendo-se

$$T^i = T_{profile}^i(t), \quad \theta(t) \leq \theta_t \quad (2.6)$$

onde $\theta(t)$ é o ângulo do virabrequim no tempo t e $T_{profile}^i(t)$ é a temperatura média da região na solução de CFD contida na zona em função do tempo. A partir do ângulo crítico θ_t , o problema passa a ser assumido pelo método multizonas que fornecerá a condição do campo de temperatura e pressão que será novamente reassumido pela solução de CFD posteriormente. Essa estratégia consome maior tempo computacional e depende de estratégias de integração e interpolação entre a solução de CFD e o método multizonas.

Finalmente, para valores do ângulo do virabrequim maiores que θ_t , a temperatura das zonas é obtida da solução da equação da conservação da energia para a mistura contida na zona, a qual é escrita na forma

$$\rho^i c_v^i \frac{dT^i}{dt} = -\sum_{k=1}^k \dot{\omega}_k^i W_k^i u_k^i - \frac{P^i dV^i}{V^i dt} - \frac{h_w^i (T^i - T_w^i) A_w^i}{V^i} \quad (2.7)$$

onde P^i , T^i e V^i são a pressão, temperatura e volume, c_v^i é o calor específico a volume constante, u_k^i é a energia interna e h_w^i é o coeficiente de convecção superficial na área A_w^i de contato com a parede da câmara de combustão, para a zona i .

2.3.2 Modelos de CFD

CFD (*Computational Fluid Dynamics*) também tem sido utilizado na análise da combustão em HCCI. Os modelos utilizados, ou investem na análise detalhada dos processos físicos de transferência de calor, massa e quantidade de movimento utilizando cinética química global, ou utilizam cinética química detalhada e simplificam a análise do escoamento. Um exemplo dessa seguinte possibilidade é o trabalho de Aceves *et al.* (2000). Eles realizaram uma análise numérica retirando da equação da energia o termo de transferência de calor por convecção no momento em que se inicia a combustão, resolvendo apenas a energia química e o termo de trabalho de expansão e compressão. O resultado mostrou um valor muito próximo do obtido com a modelagem completa, comprovando que o termo de transferência de calor por convecção é muito pequeno, comparado com o valor do calor produzido pela combustão. Como consequência, os modelos em CFD tem sido utilizados para descrever a distribuição de temperatura e massa no momento que antecede a combustão, gerando condições iniciais para a aplicação de modelos multizona. Isto acontece devido ao custo numérico e consequentemente temporal que uma simulação completa em CFD demandaria para realizar o processo em HCCI (YAO; ZHENG; LIU, 2009) (ACEVES; *et al.*, 2001).

Trabalhos publicados nos últimos anos, tem intensificado a utilização da ferramenta de CFD para análise em HCCI e SACI (Spark-Assited HCCI) usando DNS (*Direct Numerical Simulation*). Alguns foram realizados para identificar a capacidade que flutuações da temperatura que ocorrem na estratificação térmica tem em alterar os tempos característicos da combustão. Além disso, a implementação do HCCI através do SACI vem sendo estudada intensivamente em DNS

como uma saída para tornar mais brandas as variações das propriedades físicas. Discussões mais aprofundadas sobre esse tema são vistas nos trabalhos de Truffin e Colin (2011) e Yoo *et al.* (2013).

Recentemente, Bhagatwala, Chen e Lu (2014) realizaram diversas simulações em DNS utilizando etanol em um motor operando em modo HCCI e SACI em que os tempos de compressão e expansão eram emulados por trocas térmicas. Um dos vários objetivos do trabalho era criar correlações que ligassem os efeitos de saída da simulação como o IDT, e consequentemente, variações da taxa de aumento da pressão, evolução da temperatura, pressão e HRR com condições de entrada. Os resultados são apresentados na Figura 2.16. A linha em azul corresponde a uma situação em que a estratificação de combustível é correlacionada negativamente com a estratificação térmica, isto é, eram inversamente proporcionais. A linha em preto representa uma mistura homogênea entre ar e combustível em todas as regiões. A linha em vermelho representa um resultado randômico e finalmente a linha tracejada mostrava o motor operando como compressor. Observa-se que para os três casos temperatura e pressão inicial eram idênticas. A Figura 2.16 evidencia que a linha vermelha revelou um IDT extremamente baixo e consequentemente temperatura, PRR e pressão foram bastante grandes. Os autores atribuem além da concentração, a alta sensibilidade do etanol a temperatura. Na outra extremidade está a correlação negativa, em que a alta concentração de combustível em regiões frias fez com que o IDT atrase pelo menos 5°C.

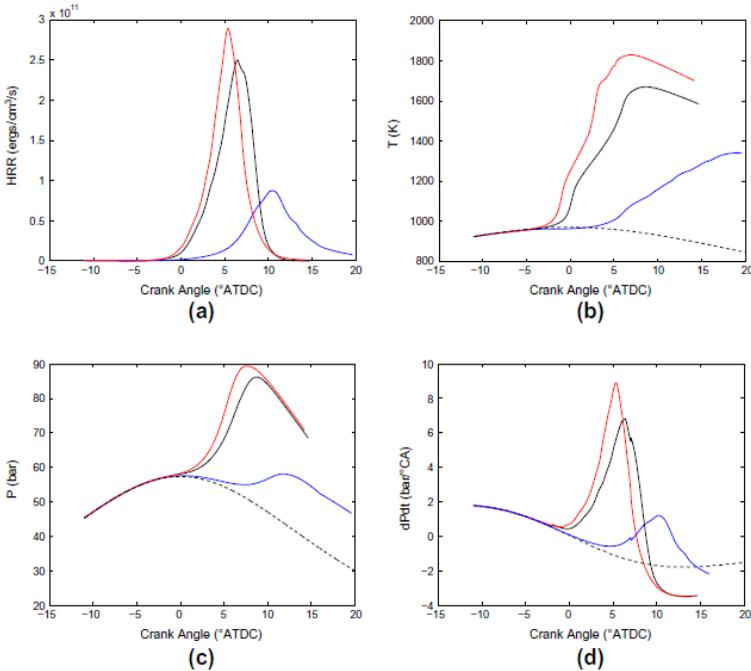


Figura 2.16 - (a) HRR, (b) Temperatura, (c) Pressão e (d) PRR.

Linha vermelha indica correlação randômica de distribuição da mistura ar/combustível. Linha azul representa correlação negativa entre estratificação da mistura ar/combustível com a estratificação térmica. Linha preta mostra mistura homogênea em toda a região.

Linha tracejada mostra o motor operando como compressor.

Fonte: Bhagatwala, Chen e Lu (2014)

3 MATERIAIS E MÉTODOS

O presente trabalho foi baseado em Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005). Genericamente, fundamenta-se na análise do efeito da variação da temperatura e massa das zonas no modelo multizonas, porém, sempre mantendo a energia total disponível na câmara de combustão, química mais térmica, igual ao valor previsto no primeiro caso validado de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005). Utilizou-se o modelo multizonas disponível no software ChemKin®. A fim de reduzir o custo computacional, utilizou-se um mecanismo cinético reduzido para o iso-octano.

A seguir, descreve-se os modelos utilizados, como as variação de temperatura são impostas e quais são os parâmetros de desempenho observados.

3.1 MODELAGEM DO MOTOR

3.1.1 Condições iniciais

Esse trabalho visa estudar as condições que levam ao funcionamento estável de um processo de combustão HCCI. Conforme discutido acima, essas condições são definidas pela energia contida na câmara de combustão e pela variação espacial dessa energia. Portanto, as condições iniciais de temperatura e massa impostas em cada zona se tornam os parâmetros independentes nas simulações. Os parâmetros de referência são os mesmos usados por Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005). Assim, as condições iniciais das simulações são os valores de massa, composição, temperatura e pressão da mistura contida na câmara de combustão existentes no ponto morto inferior nos trabalhos de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005) e são, portanto, conhecidos. Porém, a distribuição espacial da massa e da energia no interior da câmara de combustão resultam de detalhes do projeto do motor e do escoamento durante a admissão e são desconhecidos para os motores usados por Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005). Esses valores poderiam ser obtidos a partir de uma solução de CFD, como descrito acima, mas essa solução se tornaria específica do motor e condições de operação em estudo, sendo influenciada, por exemplo, pelo desenho da câmara de combustão, sede de válvulas e condutos de admissão, e não exibiria uma generalidade que permitisse extrapolar a análise para outras condições.

O método utilizado nesse trabalho consiste em analisar o cenário de uma forma paramétrica, através da definição da distribuição de energia e massa e da definição de métricas que caracterizem essa distribuição. A distribuição de energia e massa utilizada deve, em primeira análise, reproduzir adequadamente os resultados de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005). Então, outros valores de distribuição podem ser estipulados e os seus efeitos no comportamento do motor podem ser verificados. Dessa forma, é possível cobrir uma larga faixa de variações encontradas em aplicações e discutir quais condições tornariam a operação em HCCI estável e controlável.

Uma vez que a quantidade de combustível na mistura é fixada previamente, a distribuição de energia enfoca apenas na energia sensível. A energia sensível total disponível na câmara pode ser determinada por

$$mc_p \langle T \rangle = \sum_{i=1}^N m_i c_p T_i \quad (3.1)$$

Assumindo que o calor específico em cada zona seja aproximadamente igual ao calor específico médio, a temperatura média (mássica) na câmara de combustão torna-se,

$$\langle T \rangle = \sum_{i=1}^N Y_i T_i \quad (3.2)$$

ou,

$$\sum_{i=1}^N \frac{Y_i T_i}{\langle T \rangle} = 1 \quad (3.3)$$

A energia interna total, ou, alternativamente, a temperatura média do sistema $\langle T \rangle$ especificada nas condições iniciais, é mantida a mesma para todas as situações analisadas. Cada termo i do lado esquerdo da Eq. (3.3) é referenciado, ao longo do texto, como a fração energética contida na zona i .

Define-se a média das temperaturas das zonas como

$$T_m = \frac{\sum_{i=1}^N T_i}{N} \quad (3.4)$$

Finalmente, a estratificação da temperatura TW é definida como a diferença entre a maior e a menor temperatura, sendo,

$$TW = T_{\max} - T_{\min} \quad (3.5)$$

3.1.2 Estratificação térmica e mássica

De acordo com Sjöberg, Dec e Cernansky (2005), a condição de estratificação térmica e mássica a ser implementada como condição inicial em TDC é mostrada na Figura 3.1. Na Figura 3.1 são identificadas um total de 5 zonas. A primeira zona (à esquerda na Figura 3.1) é considerada inativa. Com temperatura de 290 K e compreende 14 % da massa total de mistura. Essa zona corresponde à parcela de mistura que não entra em ignição nas regiões periféricas da câmara de combustão. O restante da massa de mistura é distribuída igualmente entre as 4 zonas restantes, cada qual recebendo 21,5 % da massa total. Cada zona representa uma faixa de $\pm 2,5$ K em torno da temperatura especificada. Assim, define-se que estas zonas ativas representam uma espessura térmica (TW_{bdc}) de 20 K, como ilustrado.

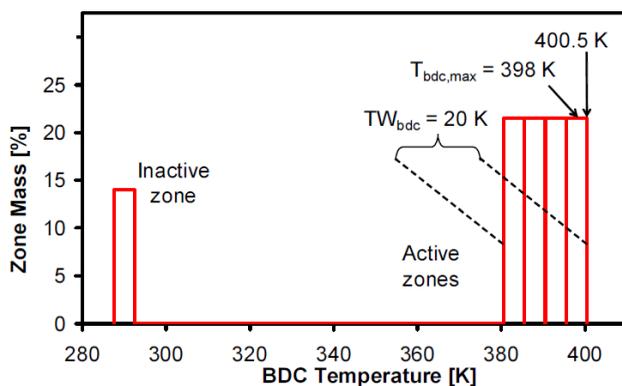


Figura 3.1 - Estratificação térmica e mássica.

Fonte: Sjöberg, Dec e Cernansky (2005)

Usando a equação da conservação da energia para as zonas, um algoritmo foi escrito com intuito de estabelecer uma série de casos com configurações de distribuição de temperatura e massa dentro do cilindro. Assim, para cada caso abordado se define uma condição de estratificação térmica e TW, e em função desta, se especifica a distribuição de massa com a restrição de conservação da energia. Além disso, foram determinadas duas configurações possíveis de gradientes mássicos (EM - Estratificação Mássica), podendo ser, GPEM (Gradiente Positivo de Estratificação Mássica), ou GNEM (Gradiente Negativo de Estratificação Mássica), tomando a parede do cilindro como ponto de referência espacial, sendo a direção crescente aquela para o centro do cilindro.

As Figura 3.2 e 3.3 serão usadas para ilustrar como as condições discutidas acima serão atribuídas e usadas para análise. Nelas, cada retângulo representa um caso estudado. No eixo da temperatura, identifica-se a temperatura termodinâmica da mistura $\langle T \rangle$, a mesma para todos os casos, e para cada caso, a média das temperaturas T_m , que varia como resultado da atribuição de temperatura para cada zona. Para cada caso, usa-se uma flecha cuja direção indica a direção na qual a massa é estratificada e cuja espessura indica a intensidade na qual a massa é deslocada para manter a temperatura média da mistura constante. Os casos são escolhidos de forma a representar diferentes estratificações de massa e energia para a mesma energia e massa totais, dessa forma permitindo analisar o efeito dessas configurações na estabilidade da combustão.

A Figura 3.2 apresenta as condições de gradiente de massa positivo (GPEM), ou seja, a distribuição de massa está mais deslocada para o lado das temperaturas maiores, que é a região mais interna do cilindro. O primeiro retângulo identifica a condição inicial vista na Figura 3.1. Todos os casos apresentam a média da temperatura T_m menor que a média da temperatura do caso inicial $T_{m,i}$, indicando que a massa deve ser deslocada para o lado quente para que a energia total, representada por $\langle T \rangle$, se mantenha constante. Quanto maior o deslocamento de T_m em relação a $T_{m,i}$, maior a intensidade da estratificação da massa. O caso 1 representa uma grande estratificação de temperatura, ou seja, um alto TW, mas observa-se que T_m é próximo a $T_{m,i}$, o que implica em uma baixa estratificação de massa. O caso 2 possui uma temperatura máxima muito próxima à condição inicial, porém a temperatura mínima é bem menor. Assim, tem-se alto TW e uma alta estratificação de massa. Nos casos 3 e

4, manteve-se a mesma espessura térmica TW e apenas deslocou-se as temperaturas máxima e mínima para valores progressivamente menores. O caso 3 apresenta um T_m muito próximo de $T_{m,i}$, resultando em baixa estratificação da massa. Já no caso 4, o valor de T_m é significativamente menor que $T_{m,i}$, resultando em uma maior estratificação da massa.

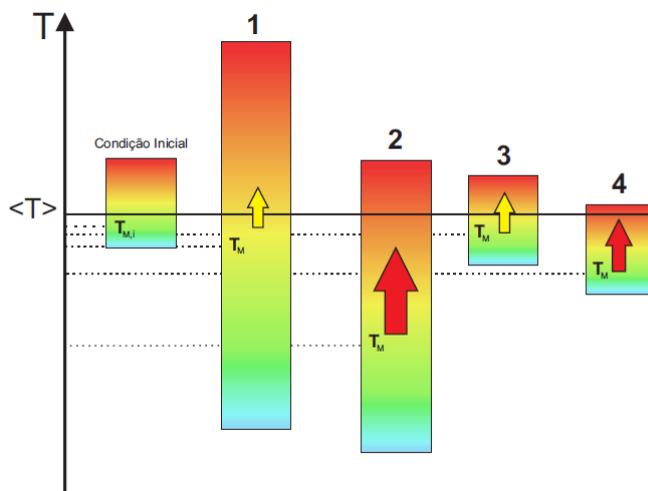


Figura 3.2 - Exemplos de distribuição de massa e temperatura para GPEM.

A Figura 3.3 apresenta condições de estratificação da massa negativa (GNEM), ou seja, a massa da mistura está mais deslocada para as regiões frias as quais estão mais próximas da parede do cilindro. Todos os casos apresentam a média da temperatura T_m maior que a média da temperatura do caso inicial $T_{m,i}$, indicando que a massa deve ser deslocada para o lado frio para que a energia total, representada por $\langle T \rangle$, se mantenha constante. Os casos 1 e 2 possuem o mesmo valor de TW , porém valores progressivamente menores de temperaturas máxima e mínima. O caso 2 exige um deslocamento maior de massa para o lado frio para manter a temperatura média constante do que o caso 1. Para o 3º, este necessitará um deslocamento ainda maior. Em comparação os casos 4 e 5 em relação ao à condição inicial, nota-se uma espessura térmica maior, mas pouca diferença de estratificação entre a condição inicial e 4. O caso 5 pode-se apresentar com condições de estratificação

quase que iguais ao padrão pois houve um alargamento tanto da parte superior quanto inferior da temperatura. Isso em resumo, diminui as "tensões" térmicas do sistema.

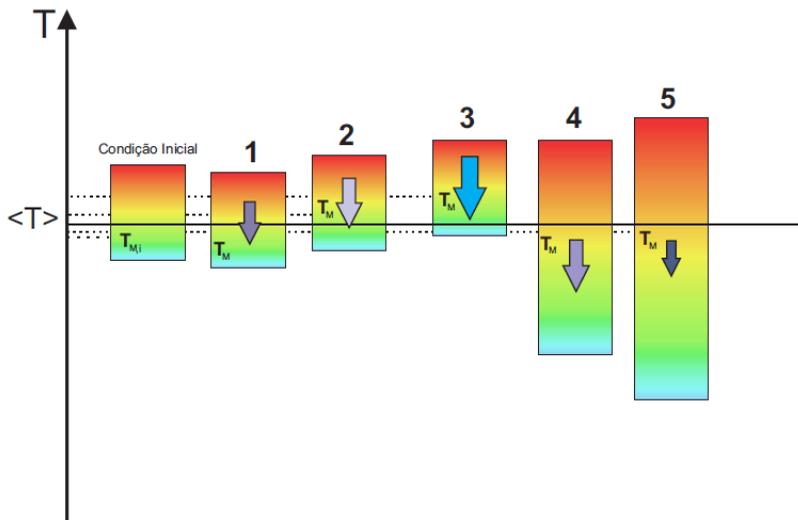


Figura 3.3 - Exemplos de distribuição de massa e temperatura para GNEM.

Todos os resultados gerados para condições de estratificação térmica produzem um número muito grande de casos possíveis de combinações de estratificação mássica. Sendo assim, foram simulados os casos que apresentassem menor gradiente para o caso de GPEM e o maior gradiente para GNEM. Isso se deve ao fato de que estamos procurando os casos que impõem limites ao funcionamento do HCCI. Isso será abordado de forma mais clara na seção 4.

3.1.3 Fração de EGR

Esse trabalho tem por objetivo avaliar apenas o comportamento de um sistema termodinâmico em certas condições de estado impostas. Dessa maneira, entende-se a presença de EGR como se fosse um EGR externo resfriado. Além disso, não é objetivo convergir a massa de EGR interna ao longo de muitos ciclos, mas apenas avaliar o efeito de uma

determinada concentração de EGR, mantendo fixa a energia total na câmara de combustão.

A razão de EGR é definida, por exemplo, em Zheng, Reader e Hawley (2004), como

$$EGR = \frac{\chi_{CO_2 \text{ admissão}}}{\chi_{CO_2 \text{ exaustão}}} \quad (3.5)$$

onde χ_{CO_2} é a fração molar de CO_2 na mistura após o fechamento da válvula de admissão.

O aumento do EGR diminui a concentração de ar. Assim, as frações molares de oxigênio e nitrogênio da presença de EGR tornam-se

$$\chi_{O_2} = 0.21 \cdot (1 - \chi_{CO_2}) \quad (3.6)$$

$$\chi_{N_2} = 0.79 \cdot (1 - \chi_{CO_2}) \quad (3.7)$$

Esse modelo é usado para determinar a composição de entrada na simulação numérica.

3.1.4 Variação da espessura térmica

Variações na rotação alteram o tempo disponível para a troca de calor (τ_{ht}) entre as paredes do cilindro e o gás. Com isso, a mistura ar-combustível tem a tendência de apresentar maior uniformidade na temperatura para altas rotações. O tempo de residência é proporcional ao inverso da rotação, $\tau_{th} \sim RPM^{-1}$, enquanto que a velocidade média do pistão é proporcional à rotação, $w \sim RPM$. Assim, a velocidade média do pistão é geralmente utilizada como a escala de velocidade do gás apropriada para a transferência de calor por convecção superficial entre a mistura e as paredes da câmara de combustão, entrando, portanto, na definição do número de Reynolds característico. Considerando que o escoamento na câmara de combustão seja turbulento, as correlações mais simples estabelecem uma dependência entre o número de Nusselt e o número de Reynolds, baseados no diâmetro do cilindro B, na forma $Nu/Re^{0.8} = const.$ Portanto, $Nu \sim w^{0.8}$. Um exemplo de correlação desse

tipo é dada em Heywood (1988, p. 678 - 680), inicialmente proposta por Woschni (1967),

$$h_c (W / m^2 \cdot K) = 3,26 B(m)^{-0,2} P(kPa)^{0,8} T(K)^{-0,55} w(m/s)^{0,8} \quad (3.8)$$

Para o escoamento em camada limite, $h_c \sim k / \delta$, onde δ é a espessura da camada limite térmica. Assim, conclui-se que $\delta \sim B^{0,2} w^{-0,8} \sim RPM^{-0,8}$. Sjöberg e Dec (2005) concluem que a variação da temperatura através da camada limite na parede é da ordem de $RPM^{-0,2}$. Com isso, Sjöberg e Dec (2005) sugerem que,

$$TW = 20 \left(\frac{RPM}{1200} \right)^{-0,2} \quad (3.9)$$

O comportamento de TW em função da rotação é representado na Figura 3.4, e será o modelo utilizado nesse trabalho.

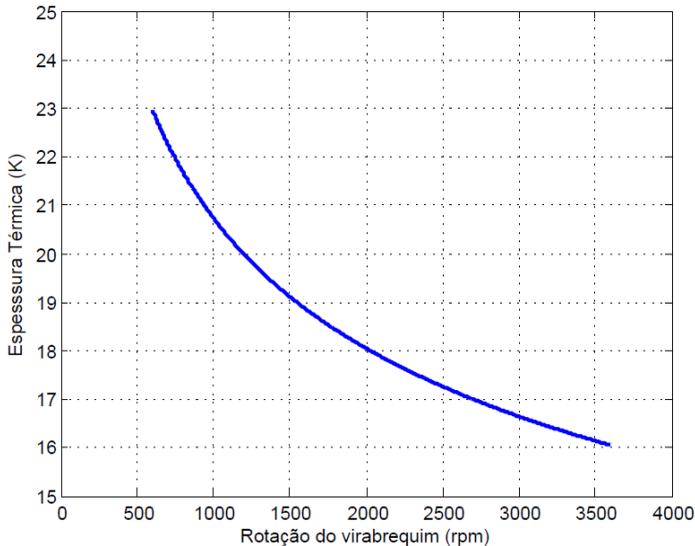


Figura 3.4 - Variação da espessura térmica TW com a rotação do motor.

3.2 PARÂMETROS DE ANÁLISE

Aqui são apresentados os parâmetros numéricos usados pela literatura para análise do processo de combustão em HCCI. Os parâmetros usados na análise de motores são muitas vezes simplificados em relação a todas as variáveis envolvidas no processo físico, porém, são muito efetivos na determinação do comportamento da combustão.

3.2.1 Referência de Combustão - CA50

Um importante fator em motores HCCI é a determinação de um parâmetro que representa um instante de referência para combustão, conhecido como *combustion phasing* ou ainda CA50. Esse parâmetro só começou a ser bem definido nas pesquisas numéricas após o entendimento de que o sistema termodinâmico da câmara de combustão não é homogêneo resultando em um gradiente térmico. Assim, os resultados passaram não mais só a definirem o atraso da ignição, mas passaram a representar com acurácia o valor do CA50 que possui grande influência no controle do PRR. Esse parâmetro é definido como o instante quando 50% da energia da reação foi liberada pela combustão. Assim, apenas como ilustração é mostrado na Figura 3.5 a taxa de liberação de calor (HHR) de uma reação em processo contínuo em um motor HCCI, que representa dois exemplos de sistemas com energia térmica distintas, e compara como estes se comportam. O CA50 é controlado pela quantidade de energia inserida no sistema. Com isso, observa-se que o sistema em vermelho se apresenta com uma energia maior que o azul. Além disso, nota-se que a combustão inicia muito antes no vermelho e a taxa de liberação de calor do azul se evidencia menor. Na próxima seção é mostrado que outros resultados finais podem ser atingidos através de análise mais aprofundada das configurações possíveis.

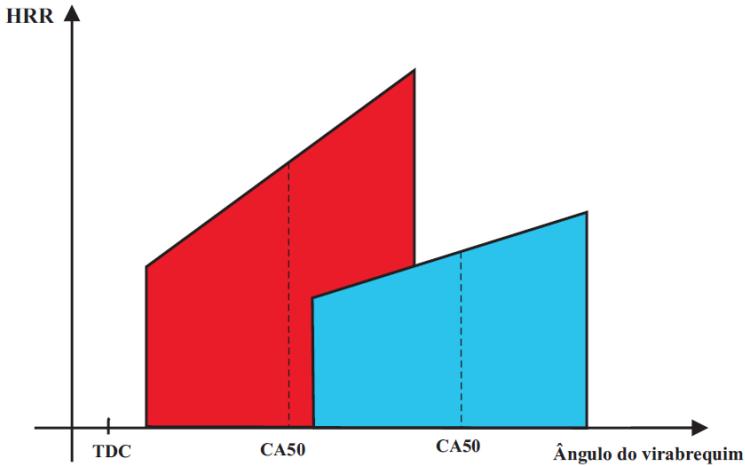


Figura 3.5 - Taxa de liberação de calor contínua vs. ângulo do virabrequim. Comportamento do HRR com a configuração do sistema.

O modelo multizona apresenta um comportamento discretizado da combustão nos permitindo analisar os efeitos da espessura térmica sobre a evolução da combustão. Assim, na Figura 3.6 observa-se a ignição de cada zona ocorrendo no momento em que a taxa de liberação de calor atinge seu maior valor e além disso, o calor líquido acumulado durante os momentos cruciais para motores HCCI, o final da compressão e o processo de expansão.

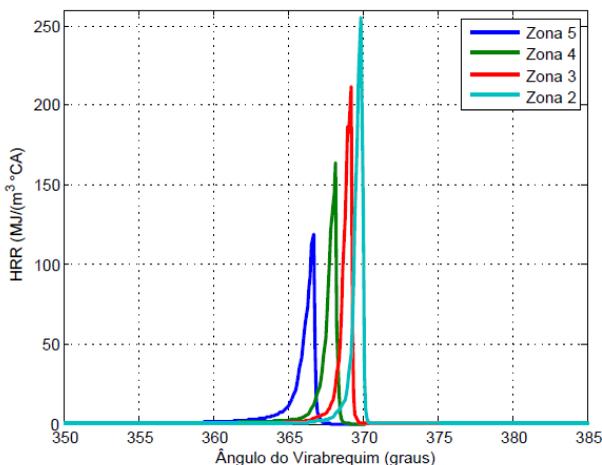


Figura 3.6 - Taxa de liberação de calor do modelo multi zonas. Revela a discretização e sequência da combustão nas zonas para um resultado ilustrativo.

3.2.2 Taxa de aumento de pressão

A simulação no modelo multizonas pode resultar em uma curva de pressão que apresenta flutuações, decorrentes da superposição dos picos de pressão sucessivos das várias zonas, especialmente, em altas razões de equivalência. Essas oscilações podem resultar em uma má interpretação do valor local onde ocorre a taxa máxima de aumento de pressão. Sjöberg e Dec (2005) definem um método para obter o PRR máximo que ocorreria se a combustão fosse contínua, ou seja, se houvesse um número infinito de zonas. Inicialmente, obtém-se os valores de taxa de aumento médio da pressão calculado para cada par de zona adjacente. Então, para cada zona, o valor o PRR máximo é aquele correspondente ao tempo no qual ocorre 50% da queima de combustível na respectiva zona. A Figura 3.7 apresenta o resultado para uma determinada condição.

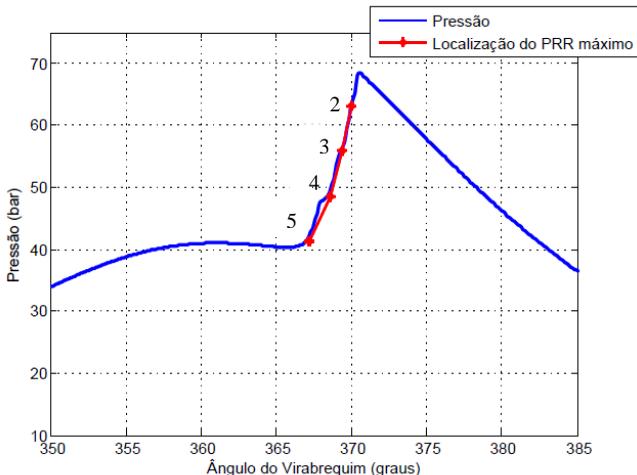


Figura 3.7 - Variação da pressão e os pontos onde são definidos os máximos PRR. É mostrado na Figura a identificação dos números das zonas.

A curva em azul corresponde à curva de acréscimo de pressão para a mistura utilizando um modelo de 5 zonas, sendo que a zona 1 não entra em combustão (conforme o esquema da Figura 3.1). Os pontos em verde identificam os locais onde ocorrem os valores máximos de PRR para cada uma das 4 zonas.

3.2.3 Critério para surgimento de ondas de pressão

Complementarmente, Eng (2002) definiu uma equação para quantificar uma intensidade de variação de amplitude de pressão que poderia resultar em danos à estrutura do motor, discutida inicialmente na seção 2.1.5. A energia por unidade de área contida em uma onda sônica pode ser expressa como

$$I = \frac{1}{2\gamma} \cdot \frac{\Delta P^2}{P} \cdot c \quad (3.10)$$

onde γ é a razão entre os calores específicos, ΔP é a amplitude da variação de pressão através da onda, P é a pressão média do fluido e

$c = \sqrt{\gamma RT}$ é a velocidade do som. Durante o processo de combustão em HCCI, ele denominou de RI (*Ringing Intensity*) a energia contida em uma onda sônica dentro da câmara de combustão, modelada pela equação

$$RI \approx \frac{1}{2\gamma} \cdot \frac{\left(\beta \cdot \frac{dP}{dt}_{m\acute{a}x} \right)^2}{P_{m\acute{a}x}} \cdot \sqrt{\gamma RT}_{m\acute{a}x} \quad (3.11)$$

onde o termo de variação de pressão é dado em kPa/ms e a pressão máxima em kPa . Então, a unidade que resulta para o RI é MW/m^2 .

O fator de escala β é medido a partir da amplitude de oscilação da pressão relativo máximo PRR. Esse fator depende das características do motor sendo analisado. Nota-se que o valor usado por Sjöberg e Dec (2005) foi o mesmo usado por Eng (2002).

Para o motor testado, Eng (2002) verificou que o valor máximo admitido de RI antes que ocorre detonação era $5 MW/m^2$. Esse valor será tomado como referência neste trabalho.

3.3 PROCEDIMENTO DE CÁLCULO E ANÁLISE

A partir do estabelecimento do método de modelagem do motor (realizado através do software Chemkin®) que irá executar as simulações e dos parâmetros; de entrada sendo as condições iniciais, e de saída apresentado pelo CA50, HRR, PRR e RI o procedimento de cálculo e análise segue as seguintes etapas:

1. Determinação de TW e do nível de T_m , a partir da temperatura da zona 5;
2. Determinação de que configuração de massa é desejada GP/GN;
3. Obtenção a distribuição de frações mássicas nas zonas.
4. São dados os valores de entrada no ChemKin®; frações mássicas das zonas, temperaturas de cada zona e rotação do motor;
5. São retirados para pós processamento valores de variação da temperatura de cada zona, variação da pressão e HRR;
6. Quando necessário analisa-se se houve a ocorrência de *Knock* através do RI.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A análise verificou o comportamento da combustão HCCI quanto à variações na distribuição espacial da massa, temperatura e, conseqüentemente, da energia. Os parâmetros analisados são a taxa de aumento de pressão e o limite do PRR. Todas as análises foram feitas mantendo-se fixa a energia disponível no motor estudado por Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005). O mecanismo reduzido de cinética química de combustão contendo 112 espécies químicas e 467 reações químicas para a oxidação de iso-octano de Xin, Law e Lu (2009) foi utilizado. Esse mecanismo foi obtido a partir da redução do mecanismo detalhado contendo 857 espécies químicas e 3606 reações químicas desenvolvido no LLNL (*Lawrence Livermore National Laboratory*) inicialmente por Curran (2002).

Conforme apresentado no capítulo de revisão bibliográfica, Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) realizaram simulações em CFD e em multizonas com o intuito de reproduzir e analisar as medições realizadas no motor que eles estudaram. Naquele trabalho, os objetivos principais daquelas simulações eram validar alguns casos experimentais com a simulação em modelagem multizonas (mesma da seção 2.3.1). Além disso, foi caracterizado a importância da espessura térmica no controle da combustão e as conseqüências do controle da distribuição de temperatura inicial do sistema sobre o controle da combustão. Assim, cada simulação daqueles autores é realizada com uma energia total diferente, o que certamente implica em comportamentos que não decorrem apenas da estratificação, mas do fato de ter-se energias diferentes. Aqui, ao invés da estratégia de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005), realiza-se todas as simulações mantendo constante a energia total da mistura na câmara de combustão e isso se torna a principal contribuição desse trabalho, como será mostrado a seguir.

Esse capítulo inicia, na seção 4.1, apresentando a solução do modelo de base de forma a reproduzir os resultados de Sjöberg e Dec (2005), com o objetivo de definir as condições de operação do motor, testar os modelos e o algoritmo numérico e de estabelecer as condições iniciais para as demais simulações. A seguir, na seção 4.2, discute-se os resultados da combustão em HCCI quando são usados os modos GPem e GNem de estratificação de massa, em relação ao estado de referência. Para isso, inicialmente, mantém-se constantes $\phi = 0,367$ e velocidade de rotação do motor 1200 rpm para todos os casos analisados. Em

seguida, na seção 4.3, as condições discutidas anteriormente sob o aspecto do controle espacial da energia do sistema são testadas nas diversas rotações que o motor pode adquirir. E por fim, na seção 4.4, analisa-se o uso de EGR que é um recurso bastante eficiente e usado em HCCI.

4.1 DEFINIÇÃO DAS CONDIÇÕES INICIAIS

A Tabela 4.1 apresenta as especificações geométricas do motor de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005) que será usado em todo o trabalho. Como ponto de referência o TDC é sempre definido em 360° .

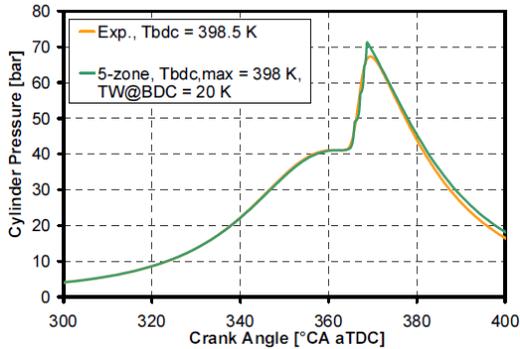
Tabela 4.1 - Especificações do motor

Deslocamento volumétrico (um cilindro)	0,981 litros
Diâmetro do Pistão	102 mm
Curso	120 mm
Comprimento da Biela	192 mm
Razão de compressão medida	17,6
Número de válvulas	4

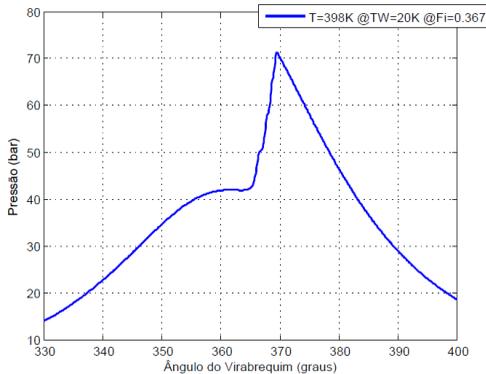
Fonte: Sjöberg, Dec e Cernansky (2005)

A maior dificuldade de gerar a condição experimental medida por Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) decorre de que algumas características da mistura e da câmara de combustão não foram mapeadas pelos autores, levando à necessidade de decisões nos valores reais dos parâmetros utilizados a fim de reproduzir as medições, conforme explicado a seguir. A Figura 4.1 apresenta a curva de pressão calculada para as condições de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005). Esse resultado representa o motor operando com baixa quantidade de gases residuais, à 1200 rpm, em mistura pobre com $\phi = 0,367$, com atraso do CA50 em 368° . Para as condições iniciais de temperatura em BDC de 398 K e espessura térmica de 20 K, a mistura é caracterizada pela temperatura termodinâmica, em BDC de $\langle T \rangle = 376,43$ K. Foram usadas 5 zonas, sendo que a zona 1 não sofre ignição, pois é considerada pelos autores a zona inativa, referente a camada limite.

A Figura 4.1 mostra em (a) o resultado do trabalho base em que é mostrado a comparação do resultado computacional com mecanismo cinético detalhado de LLNL com o experimental e do presente trabalho em (b), o qual foi usado o mecanismo reduzido para iso-octano.



(a)



(b)

Figura 4.1 - Modelo de curva de pressão para (a) trabalho com mecanismo cinético detalhado e (b) para mecanismo reduzido para iso-octano. (a) Compara o resultado experimental do motor com razão de compressão de 17,6 e $\phi = 0,38$, com modelo numérico adiabático de razão de compressão de 15,9 e $\phi = 0,367$. (b)

Emula o resultado numérico para mecanismo de cinética química reduzida. Temperatura central de 398 K, espessura térmica de 20 K à 1200 rpm com $\phi = 0,367$, CA50=368°. A temperatura termodinâmica do sistema em BDC, é 376,43 K.

Nota-se que o modelo numérico foi ajustado para representar de forma fiel a curva de pressão medida experimentalmente. Assim, enquanto no experimento a razão de equivalência era igual 0,38, nas simulações ela foi ajustada para 0,367 por causa da possível presença no

experimento de algum gás residual ao final da exaustão e início da admissão, o qual é responsável pela diluição da nova mistura e não foi quantificado pelos autores. A pressão no BDC foi modificada para 99 *kPa*. Segundo os autores, essa pressão no BDC foi usada com intuito de corrigir o que ocorre no motor real, já que a válvula de admissão permanece aberta até os 25° depois do BDC e com isso, só a partir desse ponto irá começar à compressão. A razão de compressão do motor real é de 17,6, sendo que o modelo de simulação foi ajustado para 15,9. Esse valor é usado devido a uma série de simplificações do modelo numérico, porém, que representa bem a curva de pressão até o TDC. Com isso, o modelo pode ser considerado adiabático, sem a necessidade da modelagem de troca de calor que levaria a um problema numericamente muito mais complexo. Os efeitos de *blow-by* também foram negligenciados.

Além dessas características gerais, outras condições foram usadas para gerar as condições iniciais de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005). A Figura 4.2 mostra como foi definido o gradiente de temperatura das 5 zonas no BDC. Nela é vista a zona inativa bem como as 4 zonas ativas que representam o núcleo da câmara de combustão. Em seu trabalho, Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) usaram este resultado como uma aproximação do resultado obtido de simulações detalhadas de CFD.

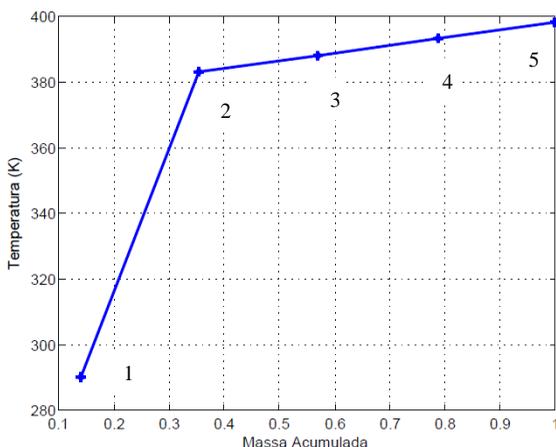


Figura 4.2 -Gradiente de temperatura no BDC para o caso validado em Sjöberg, Dec e Cernansky (2005). O número de cada zona é identificado na Figura.

Com base nessa distribuição de temperatura, depositou-se 14% da fração mássica da mistura ar-combustível na região fria, a qual não entra em ignição, como pode ser visto no histórico de temperaturas de cada zona mostrado na Figura 4.3. Essa zona fria representa os pontos no motor com ausência de combustão, como a região das folgas laterais entre pistão e parede, a camada limite e o efeito de *blow-by*. Para completar as informações sobre o modelo validado, as outras regiões foram definidas com frações mássicas constantes o que é descrito de forma mais detalhada nas seções seguintes.

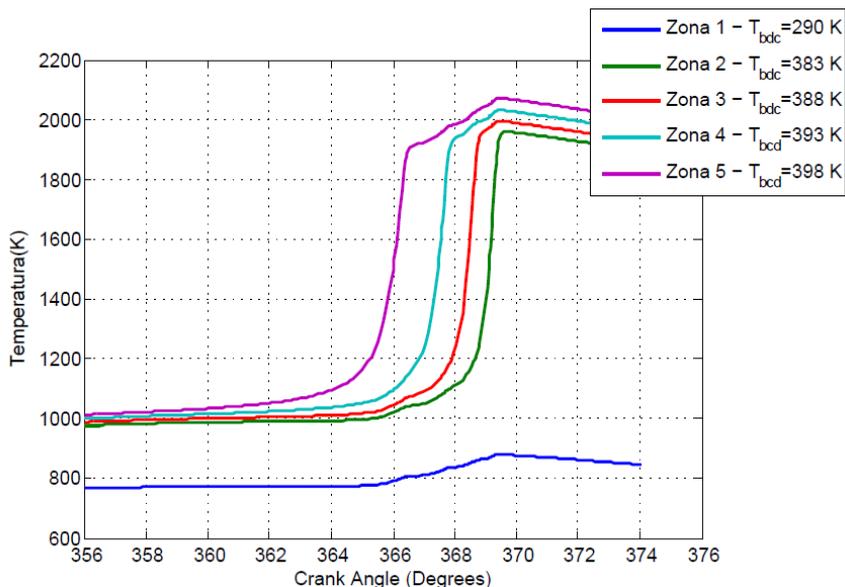


Figura 4.3 - Resultado do histórico de temperatura para curva de pressão validada. Evolução da temperatura do modelo multizona para cada zona.

Adicionalmente, mostra-se a curva de pressão abaixo para outro caso também analisado por Sjöberg e Dec (2005), para 1200 rpm com $TW=20K$, $\phi = 0,244$ para a simulação e $\phi = 0,26$ para o experimento. Nesta comparação nota-se primeiramente que a energia necessária para atingir uma mesma pressão para o caso mais pobre é maior. Além disso, o resultado para $\phi = 0,367$ revela a presença de flutuações (degraus) na curva de pressão. Isto decorre da maior agressividade da combustão para altas razões de equivalência em HCCI, o que evidencia a pouca

discretização utilizada no modelo numérico. Porém, os autores mostraram que o aumento da discretização das zonas não altera significativamente o resultado. Para finalizar, é estabelecido que a análise desse texto é voltada para discussão de altas razões de equivalência para HCII.

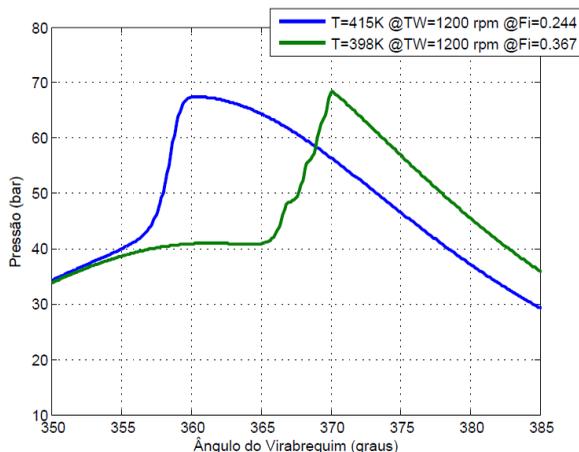


Figura 4.4 - Comparação entre curvas de pressão. Ambas as curvas com $TW=20K$ e 1200 rpm, variando com $\phi = 0,244$ e $CA50=TDC$ e $\phi = 0.367$ $CA50=368^\circ$.

4.2 EFEITO DA ESTRATIFICAÇÃO DE MASSA

4.2.1 Efeito do Gradiente positivo de massa (GPBM)

Para analisar esse parâmetro, aplicou-se variações da temperatura de $\Delta T = 5$ K, mantendo a espessura térmica constante em $TW = 20$ K, porém mudam o nível energético das zonas, ou seja, T_m se alterou. Como foi argumentado anteriormente, a energia do sistema global é mantida a mesma em todas as avaliações, porém cada zona fica submetida a níveis energéticos diferentes. As distribuições de massa resultantes são mostradas na Figura 4.5. Cada distribuição é identificada pelo valor da temperatura na zona central do motor no instante de BDC. O caso validado com o experimento em Sjöberg, Dec e Cernansky (2005), Figura 4.5, corresponde à temperatura da zona central de 398 K. Os outros casos aumentam progressivamente a estratificação de massa sempre no modo GPBM. Introduce-se uma propriedade ligada ao nível em que os gradientes

de fração mássico estão configurados. Quando uma distribuição de temperatura é definida, existe uma infinidade de possibilidades de distribuição de massa para manter a energia constante. Defini-se como GPEM mínimo aquele em que o desvio padrão da distribuição de massa ou, os gradientes de forma global do sistema, apresenta menor valor. Posteriormente durante o texto, é identificado qual sua influência dessa intensidade dos gradientes sobre os parâmetros de análise.

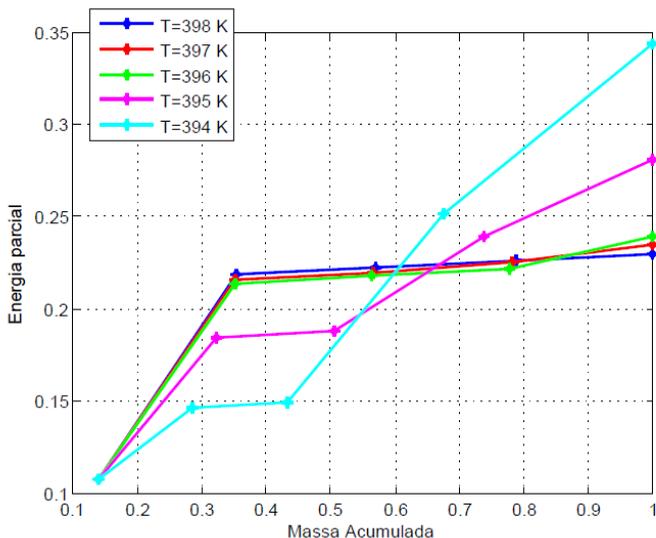


Figura 4.5 - Distribuição da Energia vs. Massa Acumulada. Uso do GPEM mínimo como possibilidade de usar o maior potencial de homogeneidade do sistema.

O sistema na condição validada mostra que a massa está distribuída na forma como fora atribuída, sendo 21,5% para cada região ativa e 14% para região não ativa. A condição de energia total constante faz com que a alteração de T_m (nesse caso, progressiva diminuição) force as frações mássicas a se deslocarem para as regiões mais quentes (mostrado no diagrama da Figura 3.2). Pode-se utilizar uma medida de desvio padrão da distribuição de energia (DP) como uma métrica para a variação espacial da energia na câmara de combustão. Caso a mistura tivesse energia homogênea, cada zona teria 20% da energia total. A distribuição de energia mostrada na Figura 4.5 pode ser convertida em

uma função de distribuição de probabilidade conforme mostrado na Figura 4.6.

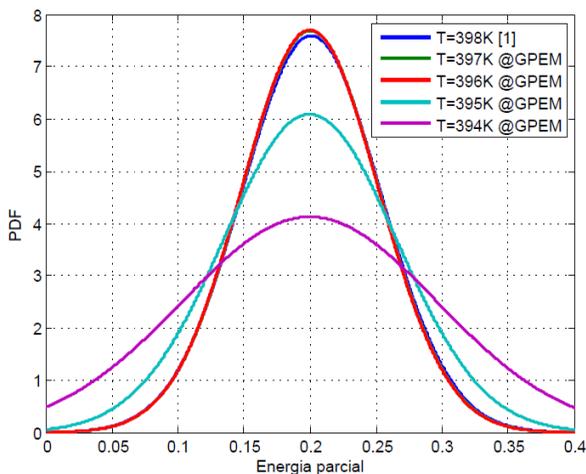


Figura 4.6 - PDF da energia parcial à partir das variações da T_m .

Quanto maior for o desvio de T_m em relação a condição padrão, maior o desvio padrão. Isso acontece porque quando a temperatura média do caso sendo estudado é inferior ao $T_{m,i}$ do caso de base, a massa deve se concentrar em regiões com mais energia para satisfazer a condição de energia constante. Essa diferença na atribuição das condições iniciais diferenciam as conclusões obtidas aqui em relação àquelas obtidas por Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e é a principal contribuição desse trabalho.

A Figura 4.7 exibe a comparação entre as curvas de pressões para os casos simulados. Os casos identificados como [1] reproduzem as simulações de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005). Os casos identificados como GPEM são os resultados obtidos com a metodologia adotada nesse trabalho. Em primeiro lugar, nota-se que nos dois modelos, semelhantemente, a combustão é sempre atrasada para os valores de T_m menores. Observa-se que em 396 K praticamente não há diferença na forma como a energia é distribuída pois ambos os modelos fornece a mesma curva de pressão. Porém, em 394 K a diferença torna-se bastante acentuada.

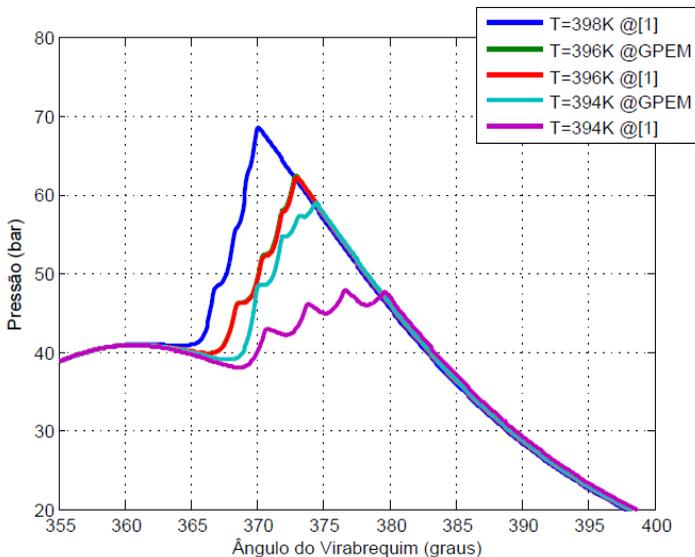


Figura 4.7 - Variação da pressão sobre diferentes temperaturas da região central, $TW=20K$.

A Figura 4.8 evidencia com mais detalhes a diferença entre os dois modelos para as simulações com temperatura inicial da zona central de 397 K à 394 K. Nos dois primeiros casos testados, 397 K e 396 K, a diferença de fração mássica permanece muito parecida à original devido à pouca diferença entre as respectivas temperaturas médias (Figura 4.6). Já o contrário é visto nos dois últimos casos, nos quais a diferença de temperatura média em relação à original força as frações mássicas a compensar a diferença de temperatura, resultando em uma quantidade muito maior de massa nas regiões quentes. Assim, a combustão passa a iniciar muito mais cedo e, aliado a isso, como grande parte do combustível foi queimado nas primeiras zonas, a duração da combustão é bastante reduzida em relação ao modelo proposto de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005).

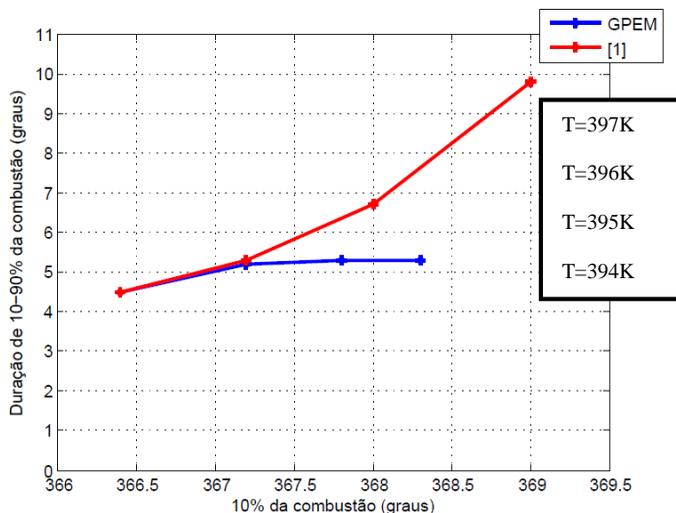


Figura 4.8 - Início da combustão vs. Duração da Combustão, TW=20K.

Assim, mostra-se que através do controle dos gradientes de frações mássicas, os parâmetros de atraso de ignição e duração da combustão podem ser modificados. Este efeito é mais explorado nas próximas seções.

4.2.2 Efeito da espessura térmica

Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005) concluíram que a espessura térmica é a propriedade com maior influência sobre o controle da combustão em HCCI, pois executa a função de atraso de ignição entre zonas sob altas cargas. Os autores mostram que uma estratificação térmica com a temperatura da região central superior a um caso em que esta mesma está em menor temperatura, porém com espessura térmica maior, pode amortecer a velocidade com que a pressão cresce no cilindro, como é evidenciado na Figura 4.9. Quando a espessura térmica foi aumentada, o sistema passou de uma energia de $\langle T \rangle = 376,43$ K em que a temperatura central era de 398 K e espessura térmica de 20 K, para temperatura central de 402 K e espessura térmica de 40 K, tornando $\langle T \rangle = 373,42$ K, o que resulta em uma cinética química mais lenta. Nota-se que a combustão foi adiantada devido as

primeiras duas zonas terem adquirido maior energia com a mudança, resultando em um adiantamento do CA50.

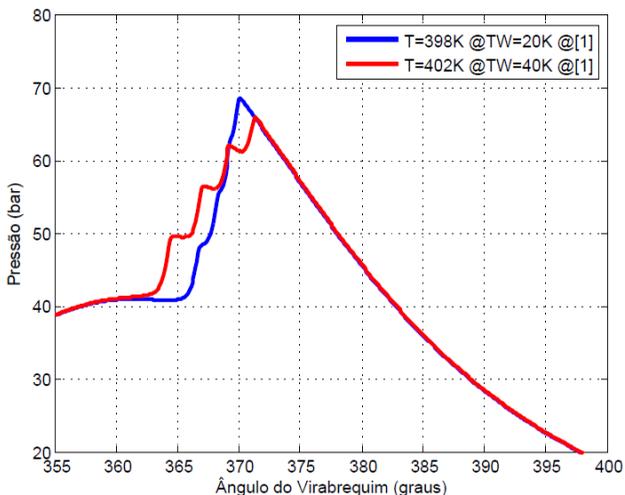


Figura 4.9 - Pressão vs. CA. Efeito do aumento de espessura térmica relatado em Sjöberg, Dec e Cernansky (2005).

Sob este ponto de vista, a Figura 4.10 apresenta a análise de como as mudanças na temperatura média e TW alteram a estratificação mássica e consequentemente as características de ignição. Primeiramente, para temperatura central de 398 K a temperatura média resultante é 370,4 K. Já para o segundo caso, 402 K, a média torna-se 367,6 K. Na seção anterior, mostrou-se que ao manter-se a energia total constante através do deslocamento da massa, a variação da temperatura origina efeitos diferentes no motor. Na Figura 4.10 mostra-se que a variação da energia total, mesmo que pequena, também tem um forte efeito na combustão, um aspecto não observado em Sjöberg, Dec e Cernansky (2005). Nota-se que a taxa máxima de variação de pressão passou de $7,8 \text{ bar}/^\circ\text{CA}$ para $4,5 \text{ bar}/^\circ\text{CA}$, atingindo um objetivo de controle do motor.

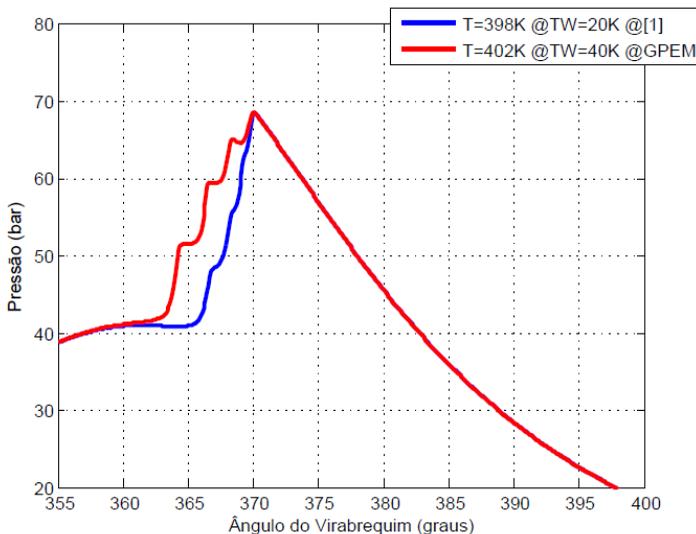


Figura 4.10 - Efeito da espessura térmica sobre a pressão com GPEM.

4.2.3 Efeito do gradiente negativo de massa (GNEM)

Até esta seção do trabalho foram realizadas análises com gradientes positivos de estratificação mássica. Além disso, foi utilizado como critério para todos os casos, o uso do menor desvio padrão na estratificação da massa, ou seja, uma análise sobre a condição que resultaria em menores PRR para esta condição. Isto revelou uma influência das temperaturas médias, implicando em estratificação de massa para manter a energia total constante, em atrasar a combustão. Agora, é analisado o efeito de gradientes negativos de estratificação mássico sobre o atraso de ignição e consequentemente sobre o PRR.

A Figura 4.11 revela como é o comportamento da curva de pressão quando são comparados três casos aparentemente semelhantes, mas com estratificação de massa em direção diferente. Esses casos se referem a um resultado com temperatura média 369,2 K (muito próximo ao validado), mas com alta espessura térmica (40 K) resultando em grandes diferenças de temperatura entre zonas. Nesse caso em que T_m é próximo do caso validado o DP torna-se baixo para os dois casos, mas verifica-se a grande influência da forma de estratificação da massa. Verifica-se que uma pequena quantidade de concentração de massa em regiões mais quentes gera uma combustão mais rápida. Já o gradiente

negativo, onde se deslocou a energia através da concentração da massa para regiões mais frias do cilindro, resultou em um efeito semelhante ao aumento de espessura térmica nas simulações de Sjöberg, Dec e Cernansky (2005).

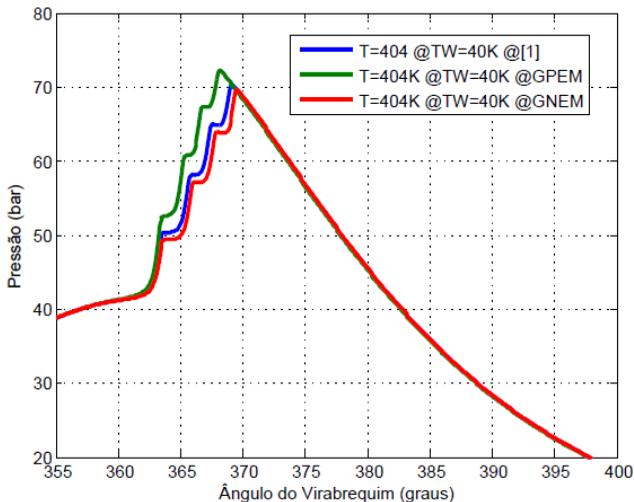


Figura 4.11 - Comparação entre os modelos de estratificação térmica e mássica e comparação entre estratificações positivas e negativas.

A Figura 4.12 mostra o comportamento da distribuição normal da energia para a configuração de GNEM. O desvio padrão da energia é crescente com o aumento da temperatura em relação as condições validadas de 398 K. A variação observada nas curvas é causada pela intensidade com que os níveis de temperatura podem ser configurados.

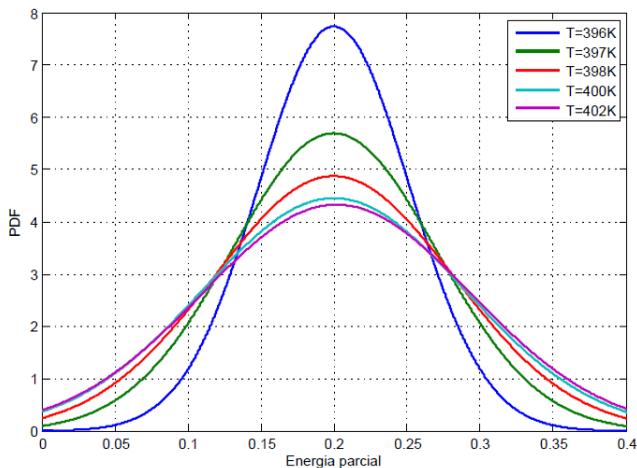


Figura 4.12 - Desvio padrão para gradiente negativo de estratificação mássica com $TW=20K$

A Figura 4.13 compara os efeitos dos gradientes positivos e negativos. O desvio padrão para o gradiente positivo foi mantido o mínimo, e para negativo fora mantido o máximo. O aumento da temperatura central para as mesmas condições de gradiente causam antecipação da combustão. A Figura 4.13 indica resultados muito semelhantes entre Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e GPBM, mesmo para condições acima de 398 K. Porém, o que mais se destaca, é a elevação do nível de atraso e da duração da combustão com GNEM. Como foi comentado nas seções anteriores, a medida que T_m cresce acima da condição validada, a possibilidade de estratificação aumenta o que torna DP maior, resultando nas maiores diferenças entre as curvas. Quando o sistema começa a diminuir sua temperatura média, a tendência é que a estratificação torne-se "mais homogênea" chegando a DP menores, o que leva a intervalo de ignições reduzidos e como se observa no gráfico, a duração da combustão é reduzida. Além disso, o ponto de temperatura de 396 K é o ponto onde o desvio padrão da energia entre os sistemas é muito próximo, o que leva às características de combustão observadas.

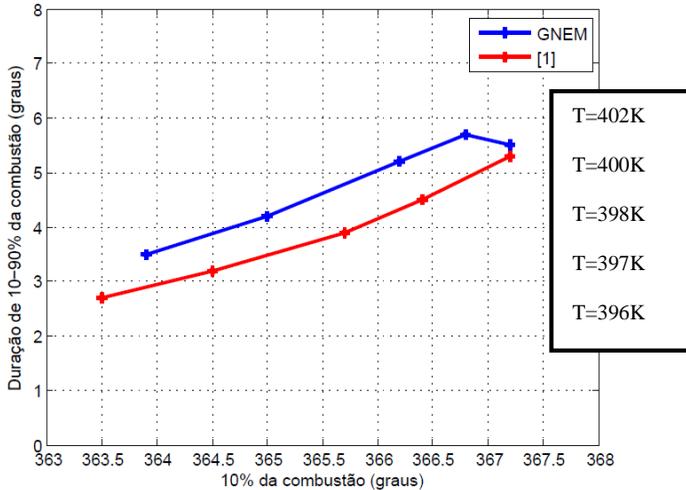


Figura 4.13 - Início da combustão vs. Duração da Combustão com TW=20K.

Além da mudança nítida vista no comportamento da curva de pressão, outra consideração é realizada. As análises nas seções 4.2.1 e 4.2.2 foram todas feitas usando dados resultantes da escolha do menor desvio padrão. Isto é justificado pelo efeito físico que buscado, já que um aumento na estratificação energética resultaria nos casos anteriores em resultados ainda mais indesejados para o PRR para GDEM. A Figura 4.14 revela a comparação entre curvas de pressão para gradientes negativos com desvio padrão máximo e mínimo à título de ilustração. Todos os casos testados para desvio padrão entre os valores máximo e mínimo encontram-se no intervalo entre estas duas curvas. O resultado final é um PRR de 7,36 $bar/^{\circ}CA$ para DP mínimo, contra 6,69 $bar/^{\circ}CA$ para o DP máximo.

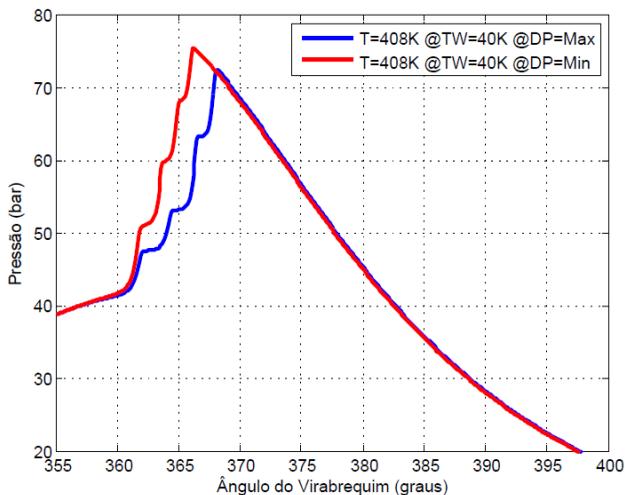


Figura 4.14 – Curvas de pressão para comparação entre desvio padrão máximo e mínimo para gradiente negativo de estratificação mássica.

4.3 ANÁLISE DA TAXA DE AUMENTO DE PRESSÃO

A seguir, analisa-se o comportamento do PRR com a variação da espessura térmica e a temperatura média das zonas.

A Figura 4.15 apresenta três curvas com espessura térmica constante e diferentes valores das temperaturas iniciais das zonas centrais. O eixo x da Figura 4.15 corresponde ao valor da temperatura da zona central. O crescimento de T_m implica em crescimento da energia total. Logo, independente da estratificação da massa, um aumento de PRR ocorre com o aumento de T_m . A curva de GPEM mostra que para o aumento da temperatura média, há um aumento do PRR. Porém, observa-se que na menor temperatura exposta a curva não segue esse padrão. Esse fato pode ser explicado voltando à Figura 4.7, onde o excesso de estratificação mássico provoca uma reação mais agressiva na primeira zona. A maior espessura de temperatura entre zonas leva a uma diluição da carga térmica (menor T_m), assim, na configuração de estratificação negativa a curva de $TW = 24$ K apresenta valores menores que $TW = 20$ K, ainda que estes cresçam praticamente na mesma taxa.

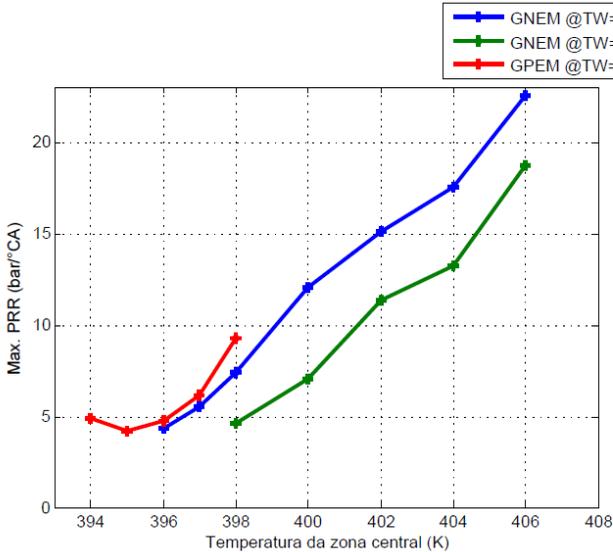


Figura 4.15 - Variação do PRR máximo vs. Temperatura inicial com TW constante. Resulta em alteração do T_m

A da Figura 4.16 mostra a variação da taxa de crescimento de pressão máxima em função da espessura de temperatura TW, em escala de Arrhenius. Esse resultado poderia ser deduzido em consequência do que foi observado na Figura 4.15. Todas as três linhas exibem o mesmo comportamento, mas com evoluções implícitas completamente opostas. Para o GPEM o aumento da espessura térmica conduz a um deslocamento de massa cada vez maior para o centro, com intuito de satisfazer a constância da energia total. Assim, para o ponto TW=20 K e temperatura central de 398 K, a distribuição da massa é homogênea resultando na maior velocidade média de reação. Com o aumento da espessura, os gradientes crescem, resultando em maior tempo para que as temperaturas das zonas atinjam sua condição de ignição. Porém, com o contínuo aumento da espessura térmica, a temperatura média T_m decai, exercendo grande influência sobre a estratificação. Para os dois casos de GNEM mostrados na Figura 4.16, a evolução da estratificação é indiferente. Nesta configuração, primeiramente, pequenos valores de TW, significam alta carga e alta T_m . Mesmo que a massa migre para regiões mais frias, estas ainda assim são muito quentes, pois T_m é maior que $\langle T \rangle$, resultando uma rápida queima. A queda do PRR torna-se intensa com a diminuição

da temperatura média do sistema, vindo ao encontro do que é visto na Figura 4.17.

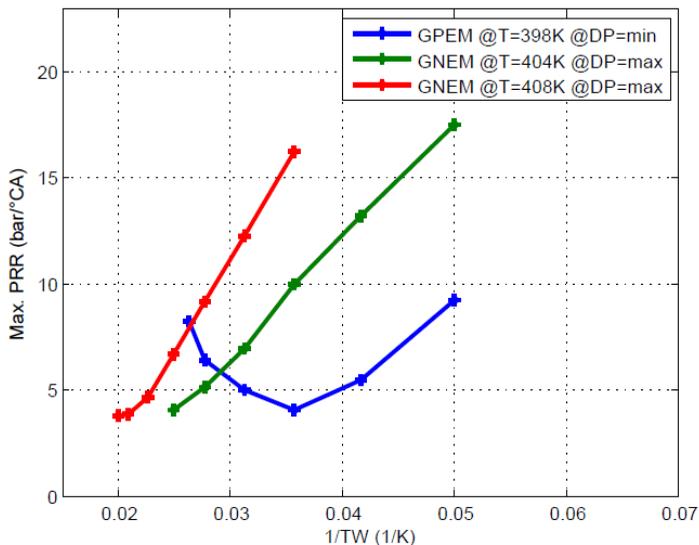


Figura 4.16 - Variação do PRR máximo vs. TW com a temperatura inicial constante. Resulta em alteração do T_m

A Figura 4.17 mostra como o desvio padrão se altera para as diferentes características de estratificação em função das temperaturas médias. Este gráfico indica que as menores temperaturas médias foram as que resultaram em menor desvio padrão e menor PRR para GNEM, sendo o contrário observado para GPEM.

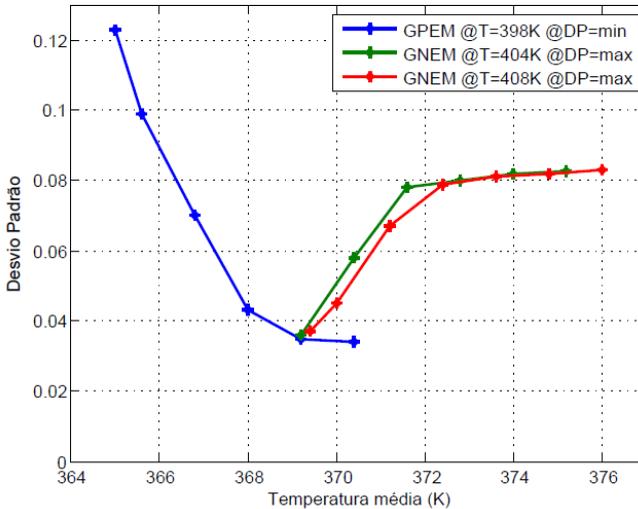


Figura 4.17 - Desvio padrão vs. temperatura média. Mostra a relação fundamental entre o DP e o PPR e comportamento inverso das curvas de GP e GN.

As discussões acima mostram o comportamento geral da influência da espessura térmica sobre a estratificação mássica e consequentemente o PRR. Entretanto, de modo a avaliar as propriedades de TW sobre HCCI valores muito grosseiros de espessura térmica foram usados como uma lente de aumento para capturar seus efeitos, o que não reflete as variações reais que a espessura térmica apresenta. Dessa forma, mostra-se abaixo alguns resultados que além de se restringir às variações de TW, isolam o efeito da temperatura média sobre a combustão e os gradientes mássicos. A análise é feita sobre uma pequena variação 1,5 K do nível das temperaturas médias. A Figura 4.18 mostra que sempre o GNEM máximo, Figura 4.20, vai resultar em menores PRR, onde a Figura 4.19 revela que a duração da combustão será sempre maior, considerando o mesmo nível de temperatura média.

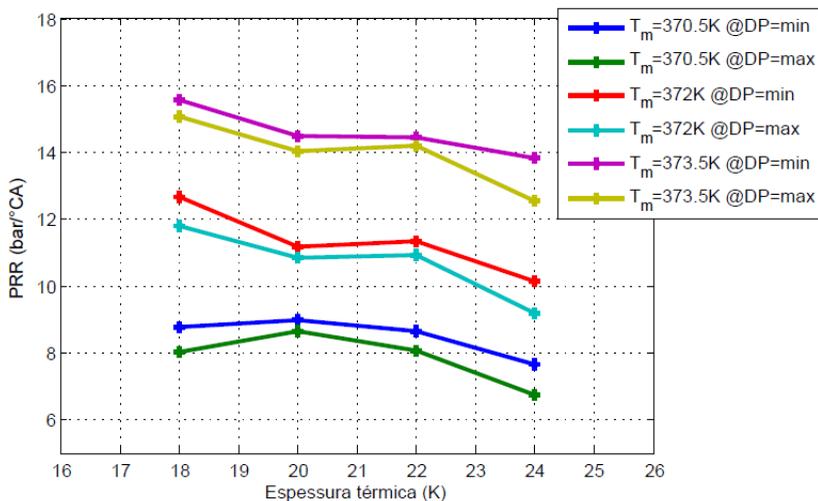


Figura 4.18 - Efeito da espessura térmica e temperatura média sobre o PRR em GNEM.

Em todos os casos, o aumento da espessura térmica, como é mostrado por Sjöberg, Dec e Cernansky (2005), aumentará o tempo de combustão. Porém, nota-se oscilações no PRR na curvas de T_m constante. Esse fato decorre do aumento das temperaturas das regiões centrais e diminuição da temperatura das regiões mais externas. Isso leva a primeira ignição a ocorrer mais cedo, ou seja, em um ângulo do virabrequim mais perto do TDC, numa posição na qual a pressão pode ser elevada mais rapidamente.

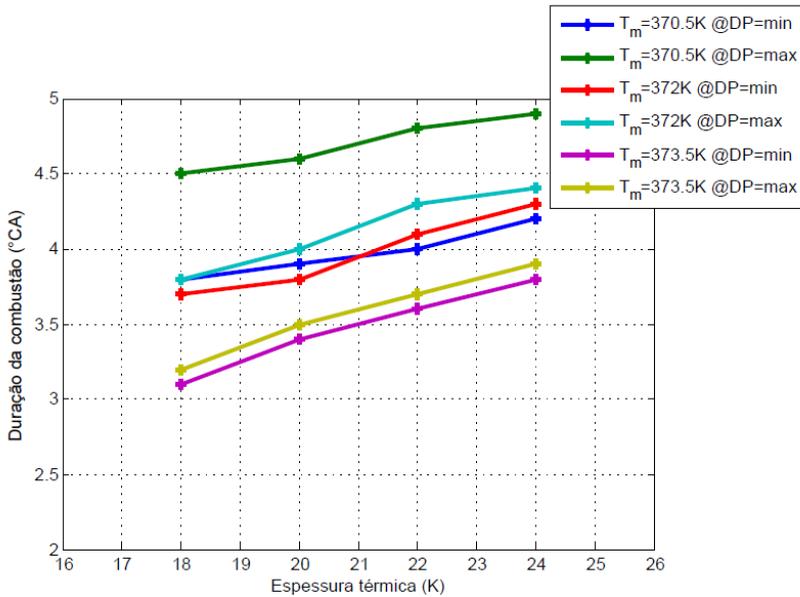


Figura 4.19 - Efeito da espessura térmica e temperatura média sobre a duração da combustão em GNEM.

A Figura 4.20 mostra o efeito da espessura térmica e temperatura média sobre o desvio padrão em GNEM. Verifica-se que pequenas variações na estratificação térmica dentro da faixa real de espessura térmica disponível nos motores resultam em imperceptíveis reduções nos gradientes de estratificação mássico, sendo este só intensificado com aumento da temperatura média.

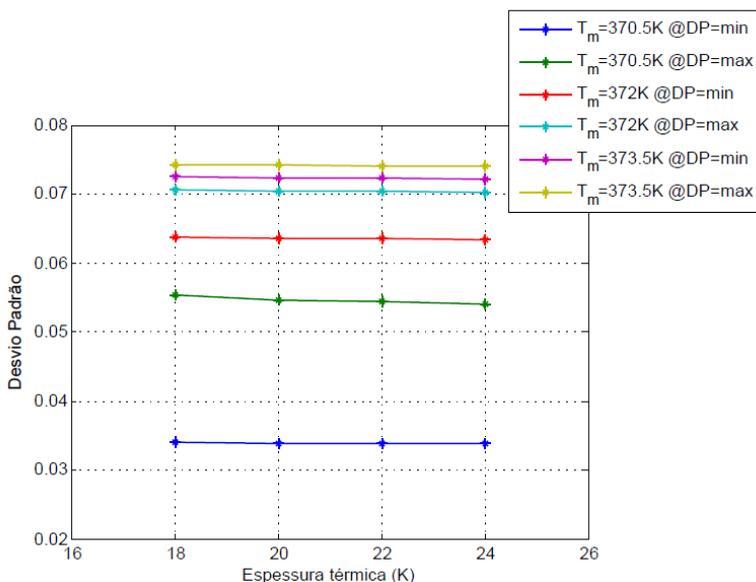


Figura 4.20 - Efeito da espessura térmica e temperatura média sobre o desvio padrão em GNEM

Conclui-se da análise acima que, apesar de toda a tentativa em aliar estratificação mássica e térmica com o intuito de atrasar a combustão, esta se apresenta com muito mais dependente do nível térmico médio em que se encontra o sistema do que das modificações para torná-lo não homogêneo. A diferença entre PRR, tanto para gradientes máximos quanto para mínimos, aumenta de forma acentuada quando a temperatura média é aumentada, e depende pouco dos outros fatores. Esse aspecto tem efeito predominante na combustão HCCI e exerce grande limitação na capacidade de controle para altas cargas.

4.4 VARIAÇÕES DE CONDIÇÃO DE OPERAÇÃO

Nesta seção o uso das condições práticas determinadas em Sjöberg e Dec (2005) são usadas para identificar o potencial da estratificação mássica em aumentar a faixa de operação em HCCI.

Primeiramente alguns parâmetros são identificados como resultado da mudança de velocidade pistão. Assim, volta-se a analisar propriedades abordadas por Sjöberg e Dec (2005) para comparar e poder expandir a discussão. Em suas análises foi determinado como a

estratificação térmica no BDC precisa ser alterada em função da rotação, para uma alta razão de equivalência, $\phi = 0,367$, e *combustion-phasing* constante, $CA_{50}=368^\circ$, para produzir um RI de $5 \text{ MW} / \text{m}^2$. A Figura 4.21 e Figura 4.22 mostram os valores de PRR em função da rotação e a forma da curva de TW exigida para evitar a detonação. Observa-se que a espessura térmica necessita ser aumentada rapidamente quando a rotação cresce de 600 para 1800 rpm. Esse aumento é exigido pois deve-se diminuir a taxa de elevação de pressão medida em $\text{bar}/^\circ\text{CA}$ e manter relativamente constante a taxa de elevação de pressão medida em bar/ms . Segundo os autores, a razão pela qual o PRR absoluto decai levemente para RI constante é primeiramente pelo baixo pico de pressão que ocorre em altas rotações. Outra questão é observada. A partir de 1800 rpm, a taxa com que se exige o aumento de TW diminui. Como fora discutido nas seções anteriores, em altas rotações deve-se diminuir o TW pois o tempo para ocorrer a combustão diminui. Porém a velocidade do pistão aumenta, aumentando a variação no tempo do volume, o que acarreta uma diminuição na taxa líquida de produção de calor na combustão. Assim, como consequência o máximo PRR medido em $\text{bar}/^\circ\text{CA}$ cai intensamente. Em compensação, em baixas rotações, o PRR máximo (em $\text{bar}/^\circ\text{CA}$) é bastante alto. Esse fato ocorre devido a combinação de baixa rotação e alta razão de equivalência. Esses fatores juntos resultam no desenvolvimento de chama fria onde a pressão dentro da câmara começa a sentir os efeitos da combustão antes mesmo do TDC.

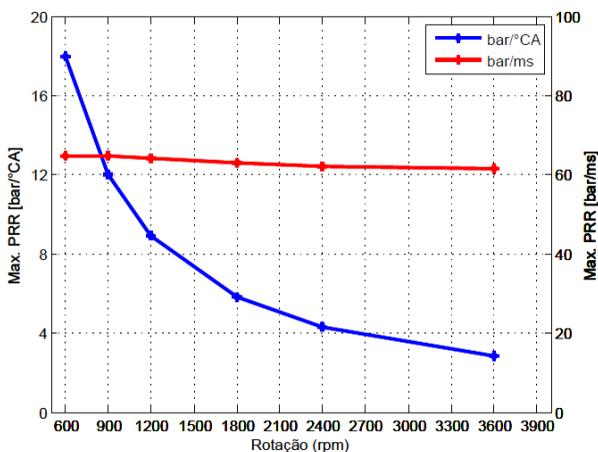


Figura 4.21 - PRR para manter RI em $5 \text{ MW}/\text{m}^2$ com variação de rotação. Condições de $\phi = 0,367$ e $CA50 = 368^\circ$. Figura adaptada do mecanismo do iso-octano de LLNL para o mecanismo reduzido de Xin, Law e Lu (2009).

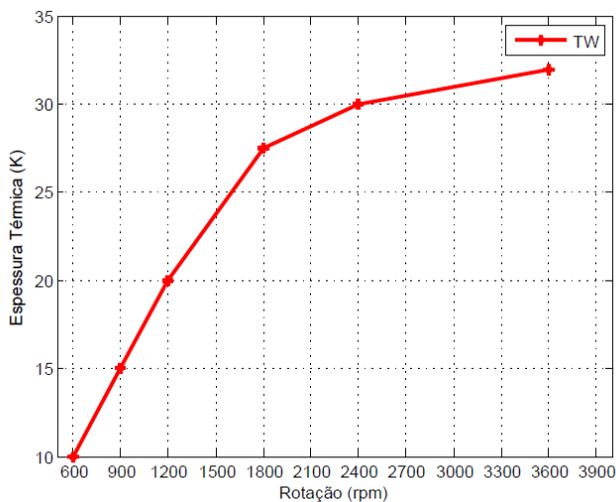


Figura 4.22 - Espessura térmica requerida para manter RI em $5 \text{ MW}/\text{m}^2$ com variação de rotação. Condições de $\phi = 0,367$ e $CA50 = 368^\circ$. Figura adaptada do mecanismo do iso-octano de LLNL para o mecanismo reduzido de Xin, Law e Lu (2009).

A Figura 4.23 revela como a energia total deve comportar-se para manter o sistema operando nas condições das Figura 4.21 e Figura 4.22. Observa-se que a variação de energia requerida decai progressivamente com aumento da rotação. Isso ocorre porque a pressão máxima e o HHR diminuem com o aumento da rotação.

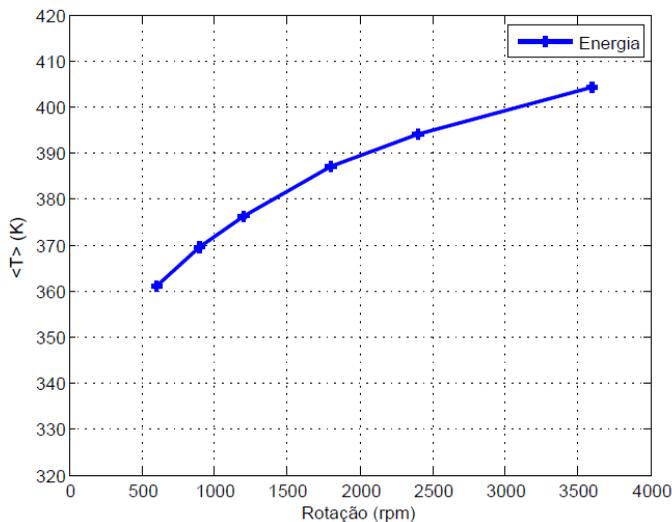


Figura 4.23 - Energia necessária para manter o sistema operando abaixo do RI limite em condições de $\phi = 0,367$ e $CA_{50} = 368^\circ$.

Como foi citado pela revisão bibliográfica no item 2.1.3, resultados suficientemente bons foram adquiridos quando diminui-se a energia do sistema de forma global para cada rotação (a partir do caso anterior) com propósito de deslocar o CA_{50} para 372° o que resultou em menor exigência no controle de TW. Apesar dos resultados serem bastante bons, o controle da energia para cada rotação do motor em processos altamente transientes com os quais a maioria dos motores são exigidos tornam-se impraticáveis.

A seguir analisa-se o comportamento das temperaturas médias máximas que o sistema pode aceitar usando a conservação da energia interna e estratificação da massa com intuito de evitar a detonação operando dentro do regime de troca de calor do motor, isto é, os valores de TW não são variáveis, mas sim constantes retiradas da equação (3.9). Um tópico relevante em se lembrar é que o potencial da estratificação

mássica é função da temperatura média do sistema, com isto, quanto mais afastado a temperatura média do sistema estiver da condição energética inicial, maior será o desvio da massa para zonas extremas do cilindro.

A Figura 4.24 ilustra como a estratificação da massa pode afetar o CA50 e conseqüentemente a evolução da pressão dentro do cilindro. Como já analisado algumas vezes durante o texto a estratificação mássica tanto positiva quanto negativa alterou as formas das curvas de pressão. Mas, as Figura 4.24 e Figura 4.25 revelam de forma conclusiva o efeito. Sobre GNEM a condição base validada, com temperatura da região central de 398K e TW igual à 20K, que estava muito perto do limite de detonação, pode ser diminuída com certa intensidade devido ao deslocamento do CA50 em torno dos 370° . Já os efeitos vistos para GPEM são contrários o que resulta no caminho oposto.

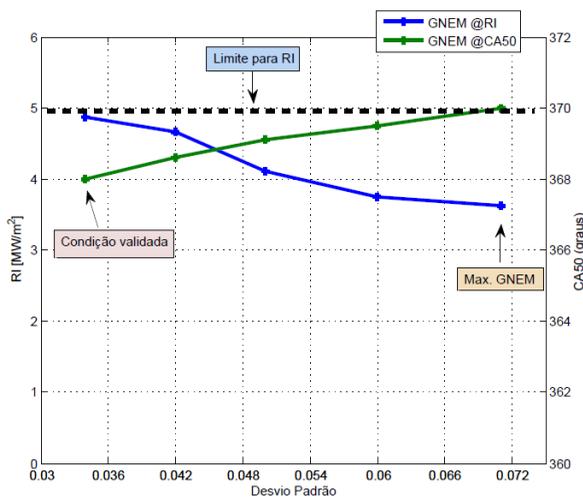


Figura 4.24 - Mudança na estratificação mássica para gradiente negativo considerando todas as outras propriedades constantes.

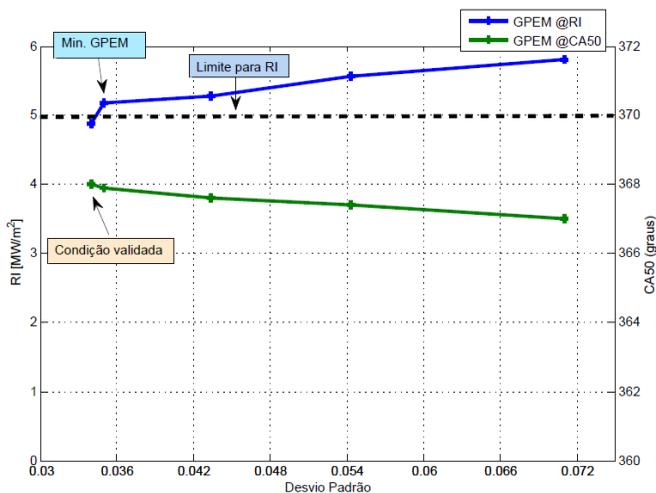


Figura 4.25 - Mudança na estratificação mássica para gradiente positivo considerando todas as outras propriedades constantes.

A discussão abaixo revela os resultados encontrados sobre o efeito da estratificação mássica em aumentar a faixa de operação dos motores HCCI. Naturalmente, segundo Heywood (1988, p. 702-703) é inerente ao aumento de rotação, a diminuição da capacidade de troca de calor do motor. Desta forma, com o aumento da rotação, a temperatura média de um motor tende a se elevar. Partindo deste argumento, as temperaturas médias do cilindro foram conduzidas a um aumento que representa o potencial ou o limite superior de temperatura média que o sistema pode suportar antes da detonação para determinada rotação. Para conduzir até o limite das temperaturas suportáveis o GNEM deve ser usado pois ele representa a maior possibilidade de atraso do CA50. Além disso, foi determinado nessa análise que a espessura térmica respeitasse a condição da equação (3.9). Além do fato da temperatura sofrer um aumento responsável pelas condições de troca térmica, a temperatura média do sistema deve ser aumentada com o aumento da rotação pois as reações devem também ser aceleradas afim de se evitar a falha de ignição. O resultado desta análise é mostrado na Figura 4.26 para $\phi = 0,367$ e $\phi = 0,42$.

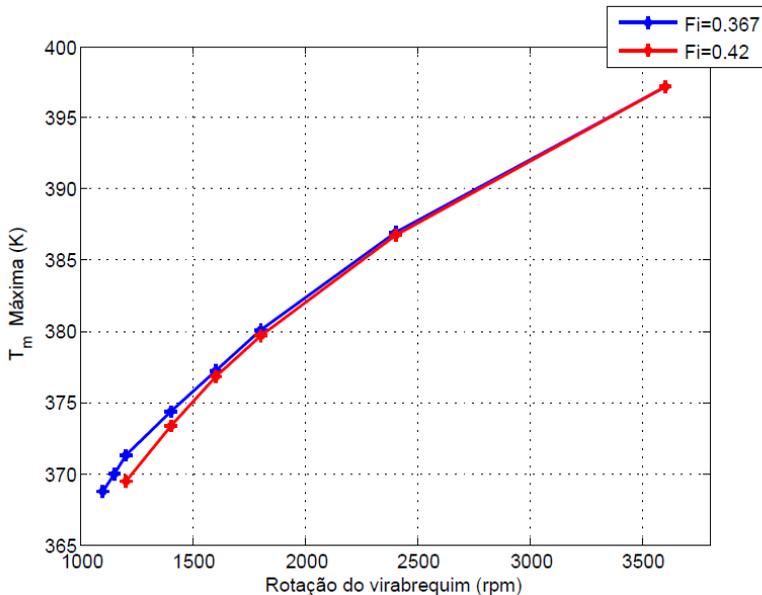


Figura 4.26 - Temperaturas Máximas Limites vs. rotação para $\phi = 0,367$ e $\phi = 0,42$.

Observando o gráfico nota-se então um amortecimento na taxa com que a temperatura média é suportada antes da detonação para aumento da rotação. Esse resultado mostra o quão impactante TW é sobre a combustão em HCCI. A medida que a velocidade do motor aumenta, TW diminui, tornando o sistema "mais homogêneo". Essa diminuição de TW influencia diretamente o potencial de T_m , pois mesmo que o sistema possa ainda aumentar sua estratificação mássica através do aumento de T_m , seu potencial em suportar um crescente aumento da temperatura média passa a ser cada vez mais contido pela influência da espessura térmica. O gráfico mostra também o comportamento do aumento da razão de equivalência. Nela é vista que se sobressai a diferença em baixas rotações, porém com o aumento a diminuição torna-se cada vez menor. A Figura 4.27 e 4.28 complementam a discussão mostrando o processo de limitação da estratificação em função das temperaturas médias limites vista na Figura 4.26. Para operar no limite suportável e retirar a maior carga possível do motor a temperatura média precisa ser aumentada. Porém, ela entra no antagonismo de não poder ser alta o suficiente pois é obrigada a atrasar o ponto do CA50 para cada avanço de rotação, sendo além disso, restringida pela contínua diminuição da espessura térmica.

Ainda, o deslocamento de T_m faz com que a capacidade de estratificação seja diminuída causando a atenuação. Assim, conclui-se que TW ainda é o principal degrau que impede uma liberdade de operação para motores HCCI.

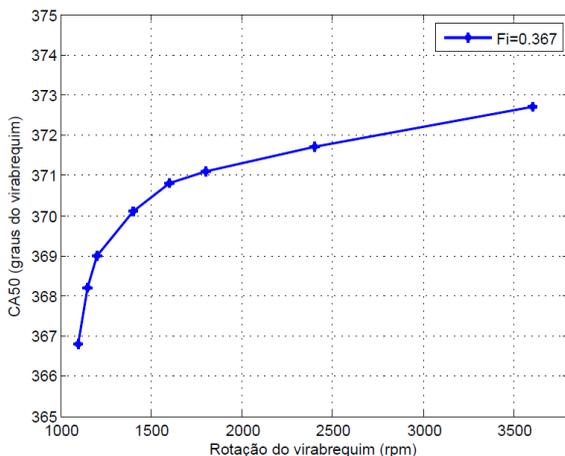


Figura 4.27 - CA50 vs. rotação. Deslocamento do CA50 com aumento da temperatura média do sistema e rotação.

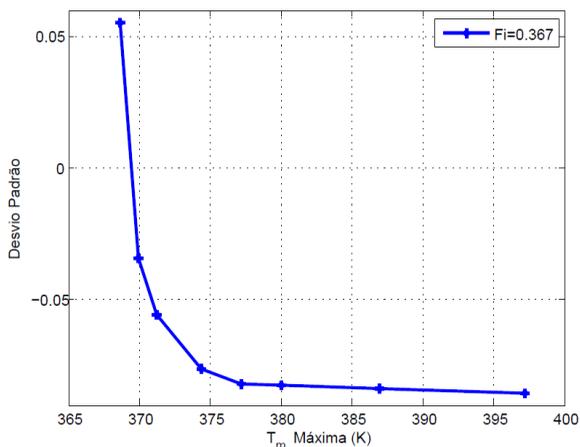


Figura 4.28 - Estratificação mássica vs. temperaturas médias limites. Ponto acima do eixo zero horizontal representa GP e abaixo GN.

A discussão acima foi realizada para o aumento de rotação a partir da demarcação de 1200 rpm corresponde a temperatura média de 371,27K. Além do efeito do aumento de rotação o efeito da redução da rotação cria algumas outras questões que são mencionadas através da Figura 4.26. Quando a velocidade do motor é diminuída abaixo dos 1150 rpm não é mais possível usar o GNEM pois T_m torna-se muito baixo não resultando mais na conservação da energia. Assim, utilizou-se o GPEM mínimo para determinar a maior temperatura média possível antes da detonação. Nessa outra fase do gráfico nota-se um aumento na intensidade de queda de T_m com a diminuição da rotação, indicando que o sistema necessita segurar com veemência a velocidade das reações. Essa queda é bastante acentuada e é explicada pela característica de funcionamento em baixas rotações. A reação em baixas rotações sofre grande influência da cinética química de baixa temperatura pois existe tempo suficiente para elas acontecerem em baixas velocidades. Dessa forma, há a formação de radicais livres precocemente antes do TDC levando a auto ignição mais cedo do combustível, mesmo tendo TW aumentado pela condição de rotação. Isto ainda é responsável pela diferença de temperaturas entre $\phi = 0,367$ e $\phi = 0,42$ para baixas rotações. É notado porém, que com aumento da rotação essa diferença cai de forma intensa. Além desses fatores que caminham contra, a necessidade de redução da temperatura faz com que o T_m exigido caia e a partir disso o GPEM começa a sofrer a inversão devida a alta estratificação mássica que as baixas temperaturas resultam como fora visto na seção 4.3. Dessa forma, em 1100 rpm foi determinada como a mínima rotação possível para essa condição de energia para $\phi = 0,367$ e 1200 rpm para $\phi = 0,42$.

A Figura 4.29 exhibe o resultado da discussão do parágrafo anterior. A temperatura limite para 1200 rpm é inferior a temperatura suportada por 3600 rpm. Porém, nota-se a grande diferença entre as curvas de pressão. Sendo que para o primeiro caso um maior pico de pressão é atingido devido a alta taxa de liberação de calor permitida pela baixa rotação.

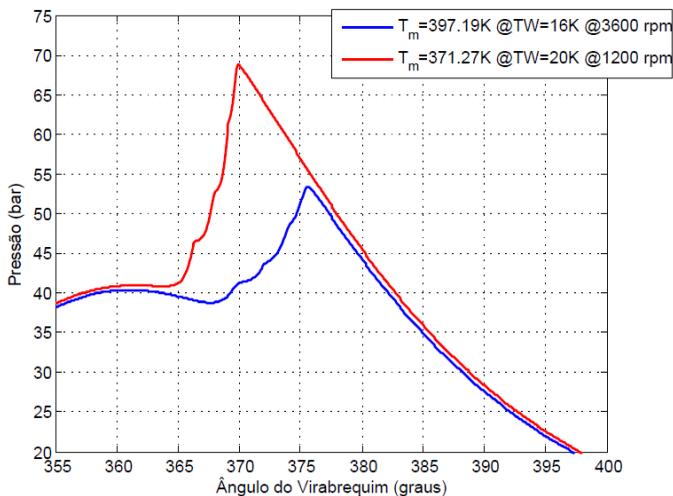


Figura 4.29 - Pressão vs. ângulo do virabrequim. Comparação entre o deslocamento da curva de pressão devido a velocidade das reações.

A conclusão acima é retirada com base nas duas Figuras, Figura 4.30 e Figura 4.31, que mostram o HRR líquido da combustão. Operando em baixa velocidade de rotação, mesmo com uma espessura térmica relativamente grande, tem-se a taxa de calor liberado bastante íngreme, resultando em um CA50 mais próximo ao TDC. Além disso, nota-se como a combustão sucessiva das zonas tem o efeito de comprimir as outras, aumentando ainda mais a taxa de reação das zonas adjacentes. O contrário é visto para alta rotação, visto que, a alta expansão dos volumes torna o espaçamento entre combustões maior e reduz o aumento líquido de calor no sistema, resultando principalmente no CA50 mais distante do TDC.

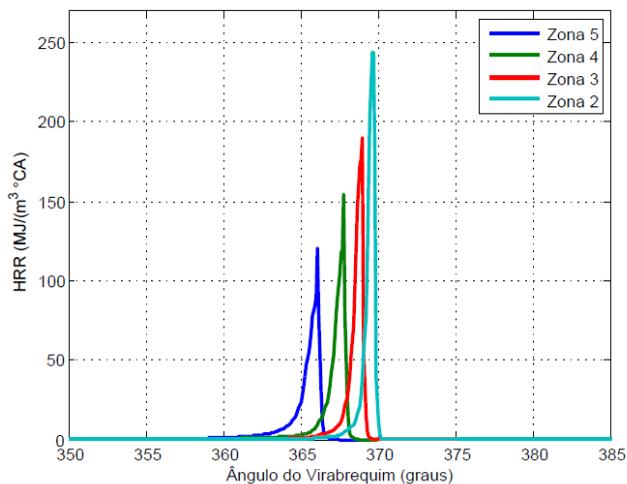


Figura 4.30 - HRR vs. ângulo do virabrequim. Utilização de GNEM com $T_m=371,27\text{K}$ $TW=20\text{K}$ e rotação de 1200 rpm para $\phi=0,42$.

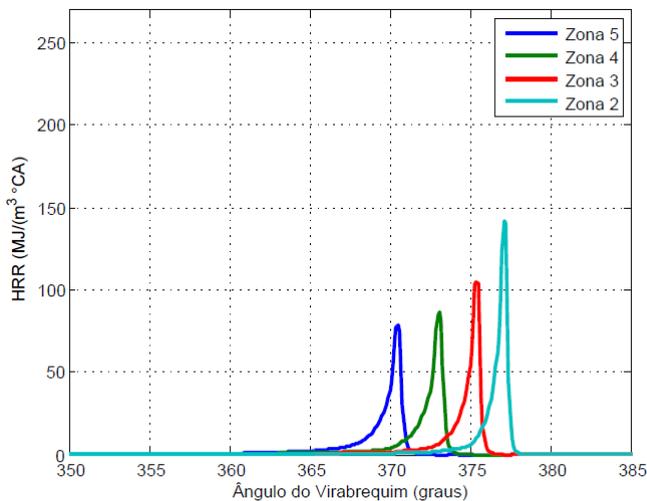


Figura 4.31 - HRR vs. ângulo do virabrequim. Utilização de GNEM com $T_m=397,19\text{K}$, $TW=16\text{K}$ e rotação de 3600 rpm para $\phi=0,42$.

A capacidade de admitir altas temperaturas é reduzida com o aumento da rotação devido a necessidade de deslocamento do CA50. Essa tendência expõe um outro resultado que leva ainda a elevar a dificuldade de controle da combustão. Como um alto CA50 está sendo usado para diminuir o risco de detonação um leve atraso na ignição das zonas do sistema pode conduzir a um ângulo do virabrequim onde o HRR não resulte em aumento líquido de calor no sistema. Este fato pode ser observado na Figura 4.32 onde a alteração de 1,5 K não resultou em falha de ignição, porém deslocou a combustão à um ponto onde não exerceu influência sobre a pressão do sistema.

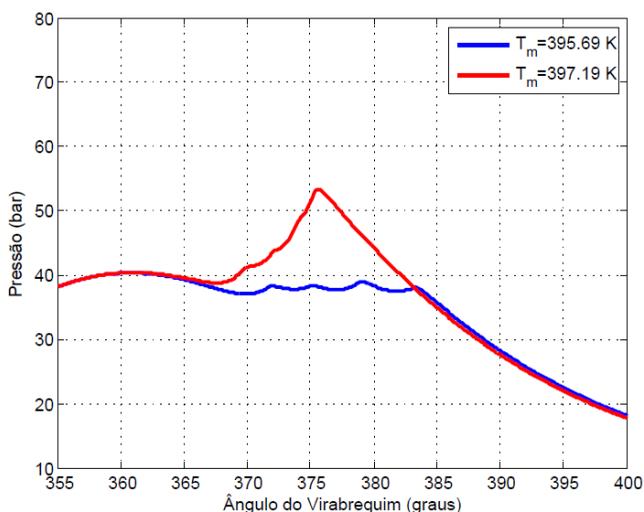


Figura 4.32 - Pressão vs. ângulo do virabrequim para 3600 rpm. Comparação entre uma diferença 1,5 K na temperatura sob altas rotações.

4.5 ADIÇÃO DE GASES DE RECIRCULAÇÃO

Na seção 2 foram determinadas algumas características e processos utilizados para o uso de EGR presente na mistura ar combustível com intuito de se controlar o momento do início da combustão e sua evolução durante o processo. É interesse deste trabalho caracterizar o modelo numérico como se fosse de EGR externo, ou frio, sendo que este foi o que apresentou melhores resultados segundo Shi (2009). Assim, o EGR encontra-se na temperatura de admissão dos gases que irão reagir na câmara.

O efeito do EGR sobre HCCI vem sendo estudado desde as primeiras análises deste processo de combustão. De forma quase idêntica ao que foi proposto nas seções anteriores, em que a estratificação térmica possui duas direções livres para controle da combustão, podendo atuar na determinação do início da combustão e na sua duração total, o EGR também age nas duas direções, porém não se pode isolá-las. Sua principal propriedade é de atrasar ignição devido ao alto calor específico dos gases que o compõe. A Figura 4.33 revela isto, onde de forma sistemática as ignições das zonas vão sendo atrasadas para EGR=0 até EGR=0,3 onde já se nota um limite para seu uso (as condições para ilustração usadas são de GPEM com temperatura central de 408 K e TW de 50 K). A grande vantagem do uso de EGR é que este possui um comportamento bastante seguro quanto a garantia de seu efeito.

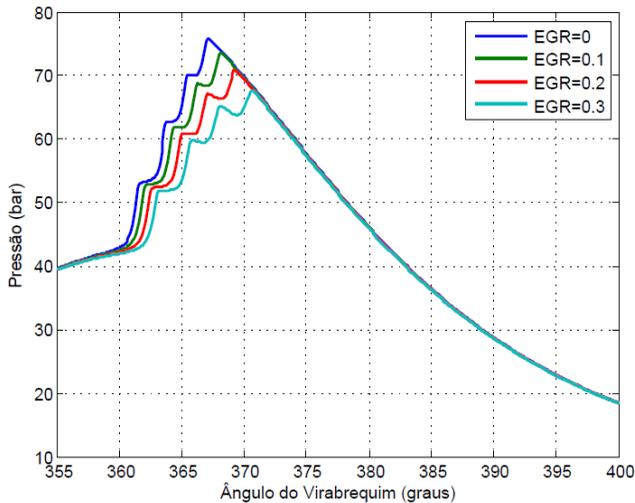


Figura 4.33 - Efeito da adição de EGR sobre a pressão. Condições de GPEM com temperatura central de 408 K, TW=50 K e $\phi = 0,367$

A seguir é feita uma pequena análise complementar ao uso do EGR com estratificação energética. Em um suposto caso do motor operando à 1200 rpm com TW igual à 20 K em que a temperatura da região central se encontra 403,5 K, a adição progressiva de gases de recirculação possui o efeito global sobre a combustão de diminuir a temperatura do sistema exibida na Figura 4.34 onde se observa a consequência dessa inferência. O RI que inicialmente estava 17 MW/m^2

decai até o limite máximo determinado a este motor. E como principal fundamento disto, o resfriamento progressivo foi o que conduziu ao CA50 ser deslocado para pontos da expansão do motor onde o calor líquido liberado pela combustão sofre uma diminuição.

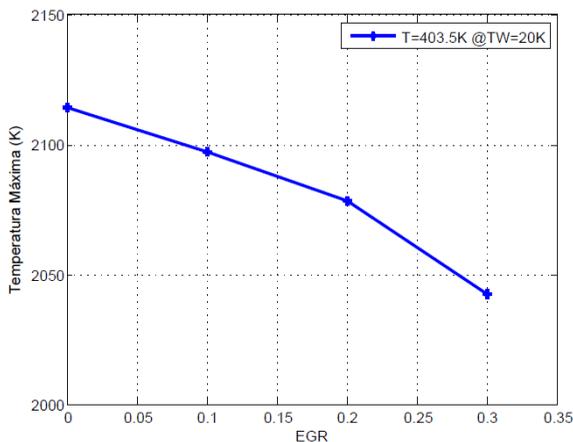


Figura 4.34 - Temperatura máxima vs. EGR. Motor operando com aumento progressivo da fração de EGR à 1200 rpm com TW=20 K e temperatura da zona central de 403,5 K.

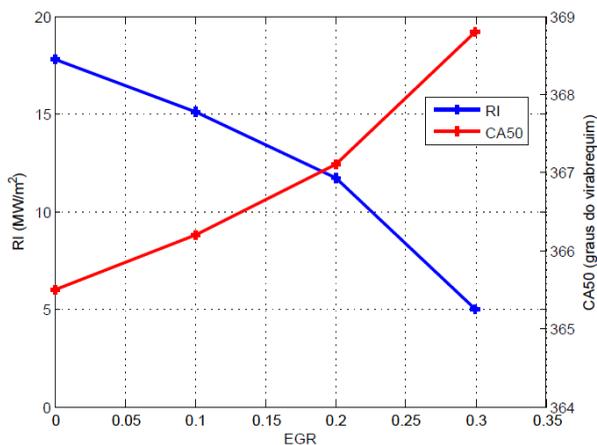


Figura 4.35 - RI e CA50 vs. EGR. Motor operando com aumento progressivo da fração de EGR à 1200 rpm com TW=20 K e temperatura da zona central de 403,5 K.

A Figura 4.36 serve como comparação com os resultados obtidos na Figura 4.26. Utilizando uma fração de 0,2 de EGR o efeito deste se torna bastante nítido. A capacidade do sistema em admitir o aumento de temperatura torna -se mais elevado, além do fato de possibilitar um aumento na faixa de rotação para alta razão de equivalência em rotações mais baixas.

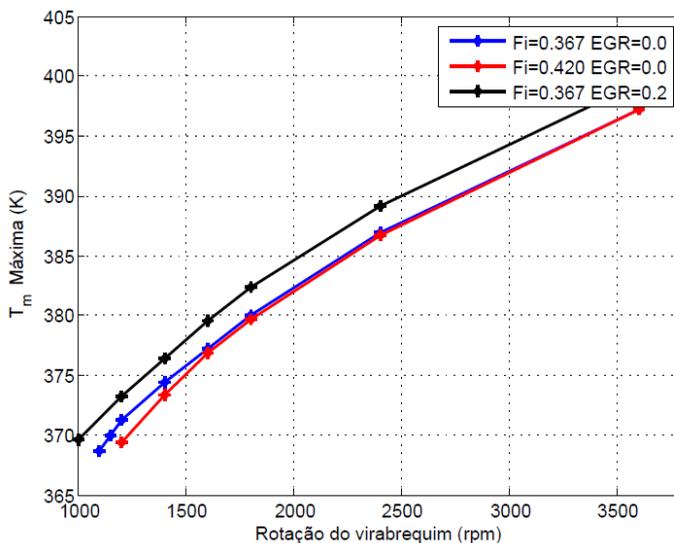


Figura 4.36 - Temperaturas Máximas Limites vs. rotação para $\phi = 0,367$, $\phi = 0,42$ e fração de EGR igual à 0,2.

5 CONCLUSÕES FINAIS E PROPOSTAS DE TRABALHOS FUTUROS

O trabalho teve como principal objetivo avaliar os efeitos sobre a combustão em HCCI com uso de iso-octano sob altas cargas através do controle espacial da distribuição de energia. Para isso, foi imposto gradientes de temperaturas como variável independente para o sistema reativo do motor e assim determinar distribuições de massa como variável dependente com o intuito de se manter a energia constante do sistema. A partir dos resultados apresentados ao longo do texto as conclusões seguem abaixo.

5.1 CONCLUSÕES FINAIS

Os resultados observados através da metodologia criada foram comparados com os da literatura quando possível. A principal diferença metodológica foi o aspecto de variação da energia do sistema. As análises feitas por este texto tinham como aspecto principal a discussão da possibilidade da operação de um motor de forma independente a controles externos, o que os próprios autores dos artigos base, Sjöberg, Dec e Cernansky (2005) e Sjöberg e Dec (2005), citam como uma impossibilidade de seus modelos. Dessa forma, os principais resultados encontrados foram,

1. O controle da localização espacial da massa do sistema possui o efeito do controle das fases da combustão, tanto quanto da ignição térmica quanto o CA50, porém, não tendo o mesmo desempenho que um controle sobre a temperatura de admissão do gás no sistema;
2. A configuração espacial de GNEM é a configuração que proporciona a redução efetiva do PRR;
3. Através de um domínio total sobre as espessuras térmicas da câmara de combustão existiria a possibilidade de controlar facilmente a combustão em HCCI. Porém, isto não é possível devido a dinâmica de troca de calor do motor que restringe a variação da espessura térmica a uma faixa bastante estreita de temperatura em relação a mudança de rotação. Essa característica parece ser bastante limitadora em relação ao aumento das faixas de operação dos HCCI, já que a cinética

química do combustível exige uma variação térmica maior para o PRR não ultrapassar seu limite.

4. A pequena variação da espessura térmica com a rotação resulta que o desvio padrão para estratificação energética não resulta em resultados que modifiquem de forma intensa o controle da taxa com que a pressão aumenta;
5. O sistema, em resumo, fica dependente da condição de temperatura média das zonas para que a cinética química ocorra de forma sincronizada com a rotação desejada, tanto para diminuir a taxa de reação para rotações baixas, quanto para aumentar as taxas de reação para altas rotações;
6. Mesmo que a combustão dependa da espessura térmica a temperatura média das zonas exerce grande influencia, pois as variações volumétricas das zonas não são independentes.
7. A evolução do perfil de temperatura do sistema para o progressivo aumento da rotação dentro do limite de RI apresenta a necessidade que este se configure de forma amortecida, o que não é uma característica para aumento de carga em motores;
8. A operação de um motor HCCI sugere que se altas cargas forem desejadas, o motor deve manter T_m próximo a temperatura da energia $\langle T \rangle$ a fim de manter certa intensidade e liberdade para variações de carga sobre altas carga. Caso contrário, o sistema quando opera com T_m muito distante de $\langle T \rangle$ mostra que pequenas variações na configuração do sistema podem levar a falha de operação, tanto no aumento do PRR quanto manutenção da cinética química para rotação elevada;
9. A utilização de gases de recirculação apresenta um aumento da eficiência do sistema no controle do PRR, pois é capaz de fazer o sistema operar em níveis de temperaturas superiores, além de permitir que se aumente a faixa de operação para baixas, rotações onde é necessário a retirada de energia.

5.2 PROPOSTAS PARA TRABALHOS FUTUROS

Além dessas conclusões surgem algumas dúvidas que podem ser investigadas de forma a completar esse estudo. Assim é sugerido estudos

bastante direcionados de acordo com dúvidas que surgiram com a realização do trabalho no controle do PRR.

1. Determinação de tempos característicos para um determinado tipo de motor e tempo característico da cinética química. O tempo da cinética química é bastante pesquisado pela literatura. Porém, a determinação do tempo característico das expansões volumétricas do motor com intuito de se construir um modelo numérico para sincronização desses tempos (para uma determinada cinética e determinado tipo de motor) e que o resultado fosse o controle da taxa de liberação de calor líquida;
2. Determinação de um combustível virtual que se adaptasse a necessidade de liberação de calor líquida do motor em HCCI. A cinética química deste poderia servir como base para adaptar misturas entre combustíveis reais afim de variar o RON para cada rotação.

REFERÊNCIAS

ACEVES, S., *et al.* A multi-zone model for prediction of HCCI combustion and emissions. SAE Paper 2000-01-0327, 2000.

ACEVES, S., *et al.* A sequential fluid-mechanic chemical-kinetic model of propane HCCI combustion. SAE Paper 2001-01-1027, 2001.

BHAGATWALA, A; CHEN, J. H.; LU, T. Direct numerical simulations of HCCI/SACI with ethanol. **Combustion And Flame**, [s.l.], v. 161, n. 7, p.1826-1841, jul. 2014.

BRADLEY, D., *et al.* Amplified pressure waves during autoignition: relevance to CAI engines. SAE Paper 2002-01-2868, 2002.

CANCINO, L.R., *et al.* Autoignition of gasoline surrogate mixtures at intermediate temperatures and high pressures: Experimental and numerical approaches. **Proceedings Of The Combustion Institute**, [s.l.], v. 32, n. 1, p.501-508, 2009.

CANCINO, L.R., *et al.* Ignition delay times of ethanol-containing multi-component gasoline surrogates: Shock-tube experiments and detailed modeling. **Fuel**, [s.l.], v. 90, n. 3, p.1238-1244, mar. 2011.

CHEMKIN-PRO, **Reaction Design**: Theory. San Diego, USA, p. 150-155, 2008.

CURRAN, H. A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation. **Combustion And Flame**, [s.l.], v. 129, n. 3, p.253-280, maio 2002.

DAVIES, V. A. **Autoignition study of ethanol and heptane in a rapid compression machine**. Master of Science Thesis, University of Akron, OH, USA, 2015.

DAVIDSON, D.F.; GAUTHIER, B.M.; HANSON, R.K. Shock tube ignition measurements of iso-octane/air and toluene/air at high pressures. **Proceedings Of The Combustion Institute**, [s.l.], v. 30, n. 1, p.1175-1182, jan. 2005.

DEC, J. E. Advanced compression-ignition engines—understanding the in-cylinder processes. **Proceedings Of The Combustion Institute**, [s.l.], v. 32, n. 2, p. 2727-2742, 2009.

ENG, A. Characterization of pressure waves in HCCI combustion. SAE Paper 2002-01-2859, 2002.

GAUTHIER, B.M.; DAVIDSON, D.F.; HANSON, R.K. Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures. **Combustion And Flame**, [s.l.], v. 139, n. 4, p.300-311, dez. 2004.

HE, X. *et al.* An experimental and modeling study of iso-octane ignition delay times under homogeneous charge compression ignition conditions. **Combustion And Flame**, [s.l.], v. 142, n. 3, p.266-275, ago. 2005.

Heywood, B. **Internal Combustion Engine Fundamentals**. New York: McGraw-Hill, 1988, p. 472, p. 678 - 680, p. 702-703.

KOMNINOS, N.P. The effect of thermal stratification on HCCI combustion: A numerical investigation. **Applied Energy**, [s.l.], v. 139, p.291-302, fev. 2015.

LÜ, X.; CHEN, W.; HUANG, Z. A fundamental study on the control of the HCCI combustion and emissions by fuel design concept combined with controllable EGR. Part 1. The basic characteristics of HCCI combustion. **Fuel**, [s.l.], v. 84, n. 9, p.1074-1083, jun. 2005.

LÜ, X.; CHEN, W.; HUANG, Z. A fundamental study on the control of the HCCI combustion and emissions by fuel design concept combined with controllable EGR. Part 2. Effect of operating conditions and EGR on HCCI combustion. **Fuel**, [s.l.], v. 84, n. 9, p.1084-1092, jun. 2005.

MEHL, M. *et al.* Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions. **Proceedings Of The Combustion Institute**, [s.l.], v. 33, n. 1, p.193-200, 2011.

NG KIAT, H; CHARALAMBIDES, A. **Advances in Internal Combustion Engines and Fuel Technologies: Homogenous Charge Compression Ignition (HCCI) engines.** Intech, cap. 4, 2013.

SCHRAMM, A. **Effects of negative valve overlap on HCCI combustion and its use in the control of HCCI combustion timing.** 2014. 127 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Mechanical Engineering, University Of Alberta, Alberta, Canadá, 2014, p. 6-8.

SHI, L. *et al.* Study of low emission homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine using combined internal and external exhaust gas recirculation (EGR). **Energy**, [s.l.], v. 31, n. 14, p.2665-2676, nov. 2006.

SJÖBERG, M., DEC, J., BABAJIMOPOULOS, A. Comparing enhanced natural thermal stratification against retarded combustion phasing for smoothing of HCCI heat-release rates. SAE Paper 2004-01-2994, 2004.

SJÖBERG, M., DEC, J., CERNANSKY, N. Potencial of thermal stratification and combustion retard for reducing pressure-rise rates in HCCI engines: based on multi-zone modeling and experiments. SAE Paper 2005-01-0113, 2005.

SJÖBERG; M., DEC, J. Effects of engine speed, fueling rate, and combustion phasing on the thermal stratification required to limit HCCI knocking intensity. SAE Paper 2005-01-2125, 2005.

TANAKA, S. Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives. **Combustion And Flame**, [s.l.], v. 132, n. 1-2, p.219-239, jan. 2003.

TRUFFIN, K., COLIN, O. Auto-ignition model based on tabulated detailed kinetics and presumed temperature PDF – Application to internal combustion engine controlled by thermal stratifications. **International Journal Of Heat And Mass Transfer**, [s.l.], v. 54, n. 23-24, p.4885-4894, nov. 2011.

VANDERSICKEL, A. *et al.* The autoignition of practical fuels at HCCI conditions: High-pressure shock tube experiments and phenomenological modeling. **Fuel**, [s.l.], v. 93, p.492-501, mar. 2012.

YAO, M., ZHENG, Z., LIU, H. Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines. **Progress In Energy And Combustion Science**, [s.l.], v. 35, n. 5, p.398-437, out. 2009.

YOO, C. *et al.* A DNS study of ignition characteristics of a lean iso-octane/air mixture under HCCI and SACI conditions. **Proceedings Of The Combustion Institute**, [s.l.], v. 34, n. 2, p. 2985-2993, jan. 2013.

WALTON, S. *et al.* An experimental investigation of iso-octane ignition phenomena. **Combustion And Flame**, [s.l.], v. 150, n. 3, p.246-262, ago. 2007.

WIJNGAARDEN B. **Numerical study of HCCI combustion of PRF mixtures compared with PCCI experiments**. Berlin: Technical Universities of Berlin (TUB), Technical Universities Eindhoven, 2008, p. 14, p. 32-36.

WOSCHNI, G. "A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine," SAE Technical Paper 670931, 1967, page 3065 - 3083.

XIN, Y; LAW, C; LU, T. A reduced mechanism of iso-octane oxidation. Paper No.23F5, 6th **US National Combustion Meeting**, Ann Arbor, MI, USA, March 17-20, 2009.

ZHENG, M., READER, G.T., HAWLEY, J.G. Diesel engine exhaust gas recirculation: a review on advanced and novel concepts. **Energy Conversion and Management**, [s.l.], v. 45, n. 6, p.883-900, abr. 2004.