

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

ESTUDO DA OCORRÊNCIA DE KNOCK PARA MISTURAS DE ISOCTANO E
N-HEPTANO EM UM MOTOR CFR MODIFICADO

por

Ivanir Fischer

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Julho de 2020

ESTUDO DA OCORRÊNCIA DE KNOCK PARA MISTURAS DE ISOOCTANO E
N-HEPTANO EM UM MOTOR CFR MODIFICADO

por

Ivanir Fischer
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Energia

Orientador: Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira

Co-Orientador: Prof. Dr. Felipe Roman Centeno

Aprovada por:

Prof. Dr. Amir Antônio Martins de Oliveira Junior, EMC/UFSC.

Prof. Dr. Andrés Armando Mendiburu Zevallos, PROMEC/UFRGS.

Prof. Dr. Mário Eduardo Santos Martins, DEM/UFSM.

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 24 de Julho de 2020

AGRADECIMENTOS

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro para a elaboração deste trabalho.

RESUMO

O knock é um fenômeno com alto potencial de dano e um dos principais obstáculos no aumento da eficiência térmica dos motores de combustão interna pois limita o aumento da razão de compressão com ponto de ignição ótimo. Entender este fenômeno ainda é fundamental para o desenvolvimento de motores mais eficientes. Diversos estudos vêm propondo modelos computacionais para prever o knock e, conseqüentemente, reduzir o custo de desenvolvimento dos motores de combustão interna. Uma das formas de modelagem utiliza mecanismos de cinética química para predição da autoignição da zona não queimada que é condição para a ocorrência de knock. Neste estudo um motor CFR foi instrumentado com uma injeção eletrônica programável para controlar a injeção de combustível e o ponto de ignição do motor e, um sensor piezoelétrico foi instalado na câmara de combustão para detecção de knock a partir da pressão de cilindro. Foram realizados testes utilizando isoctano (I) e n-heptano (H) como combustíveis, misturados nos percentuais volumétricos I100H0, I80H20, I60H40, I40H60, I20H80 e I0H100. Cada mistura foi testada para uma ampla faixa de razões de compressão e em cada razão de compressão o ponto de ignição foi avançado até a detecção do knock audível. Para cada ponto de teste foram adquiridos 200 ciclos de pressão de cilindro e pós processados em Matlab para o cálculo do fator de knock, fração de massa queimada, taxa de liberação de calor, ponto de 50% da massa queimada, pressão média efetiva indicada (IMEP), coeficiente de variação do IMEP e eficiência térmica. Um modelo de duas zonas do software Chemkin foi utilizado para avaliação do knock computacionalmente. Nesse modelo, uma frente de chama se propaga pela câmara de combustão transformando reagentes em produtos e concomitantemente um mecanismo de cinética química rege as reações da zona não queimada identificando uma possível autoignição. Esse modelo, utiliza como dado de entrada a curva de fração de massa queimada. Identificou-se que a utilização da curva de massa queimada proveniente da média dos 200 ciclos testados não é capaz de prever o knock neste modelo computacional pois, mesmo com o motor em condições de knock, a maioria dos ciclos são de combustão normal, logo, a média desses ciclos aproximam a curva de fração de massa queimada para uma curva de combustão normal. A separação e utilização apenas dos ciclos com knock para obter a curva de fração de massa queimada e utilizar como entrada no modelo se mostrou eficaz para a previsão do knock computacionalmente. Foram simulados ciclos para as seis misturas de combustíveis utilizadas no trabalho experimental. Tanto os resultados experimentais como os numéricos

mostraram a maior tendência de ocorrência de knock para o n-heptano. A intensidade do knock aumentou progressivamente com o aumento do percentual de n-heptano na mistura. Além disso, o método estocástico de detecção do knock utilizado no trabalho experimental se mostrou uma boa ferramenta para quantificar a intensidade do knock e encontrar o ponto de ignição para início de sua ocorrência.

Palavras-chave: Knock; Cinética química; Isooctano; n-Heptano; CFR; Chemkin.

ABSTRACT

Knock is a phenomenon with high potential of damage for the internal combustion engines and one of the main barriers to improve the thermal efficiency because it restrains the compression ratio rise with optimum phasing combustion. The understanding of this phenomenon is important to improve the engine development. Many works have been proposing computational models to predict the knock and hence to decrease the engine development cost. One of the model types uses chemical kinetics mechanisms to predict auto ignition in the unburned zone, which is a condition to knock occurrence. In this work, a CFR engine was instrumented with a programmable electronic injection to control the fuel injection and the spark timing. In addition, a piezoelectric pressure sensor was installed in the combustion chamber to detect the knock. Tests were performed applying Isooctane (I) and n-Heptane (H) blends at the volumetric percentages: I100H0, I80H20, I60H40, I40H60, I20H80 and I0H100. Each blend was evaluated at a large range of compression ratio and in each compression ratio the spark timing was advanced until the audible knock occurrence. For each blend, in the test point was acquired 200 cylinder pressure cycles and subsequently processed in Matlab to compute the knock factor, mass fraction burned, heat release rate, crank angle to 50% of mass fraction burned, indicated mean effective pressure (IMEP), variation coefficient of IMEP (COV_{IMEP}) and thermal efficiency. A two zones model of the Chemkin software was used to computational knock evaluation. In this model, a flame propagates in the combustion chamber converting reactants in products and, at the same time, a chemical kinetics mechanism conducts the chemical reactions in the unburned zone recognizing a possible auto ignition. This model uses a mass fraction burned curve as an input. It was noticed that the use of the mass fraction burned curve from the average of the 200 pressure cycles tested is not able to predict the knock occurrence in the computational model. Even the engine operating under knock condition, the knock does not occur in the majority of the cycles, hence, the average of the cycles leads the mass fraction burned curve to a normal combustion curve. The mass fraction burned curve considering only the knock cycles was a good way to detect the knock in the computational model. The modelling was performed by using the same 6 fuel blends applied in the experimental study. Both, experimental and numerical results, showed that n-heptane presented a higher tendency to knock than isooctane. The knock intensity increased with higher n-heptane ratio in the blends.

Furthermore, the Stochastic Knock Detection method used in the experimental section was a good way to quantify the knock intensity and to find the knock onset ignition time.

Keywords: Knock; Chemical kinetics; Isooctane; n-Heptane; CFR; Chemkin.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Estado da Arte	3
1.2	Objetivos	7
1.2.1	Objetivo geral	7
1.2.2	Objetivos específicos	8
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	9
2.1	Knock	9
2.1.1	O efeito da variabilidade cíclica na ocorrência de knock	11
2.1.2	O efeito do combustível na ocorrência de knock	13
2.1.3	Super knock	16
2.2	Cinética química	18
2.2.1	Reações elementares	18
2.2.2	Mecanismos de cinética química	20
2.2.2.1	Mecanismo de oxidação do iso octano	22
2.2.2.2	Mecanismo de oxidação do n-heptano	24
2.2.2.3	Atraso de Ignição e Coeficiente Negativo de Temperatura	25
2.3	Chemkin	26
2.3.1	Modelo SI de duas zonas	27
3	METODOLOGIA	30
3.1	Metodologia experimental	30
3.1.1	Descrição do motor de teste	30
3.1.2	Adaptações realizadas no motor CFR	32
3.1.2.1	Unidade eletrônica de controle	32
3.1.2.2	Coletor de admissão	32

3.1.2.3	Sistema de alimentação de combustível.....	33
3.1.2.4	Sistema de ignição.....	33
3.1.2.5	Medição de velocidade de rotação	34
3.1.2.6	Sensor de oxigênio	34
3.1.3	Instrumentos de medição.....	34
3.1.3.2	Sensor de pressão da câmara de combustão	35
3.1.4	Aquisição de dados.....	36
3.1.4.1	Placa de aquisição	36
3.1.4.2	Encoder.....	36
3.1.4.3	Sincronização dos dados com a posição do pistão	37
3.1.4.4	Interface para aquisição de dados.....	37
3.1.5	Realização dos testes	38
3.1.6	Processamento dos dados	41
3.1.6.1	Método para detecção do knock.....	41
3.1.6.2	Fator de knock (FK) e Intensidade de knock (KI).....	43
3.1.6.3	Trabalho indicado por ciclo.....	47
3.1.6.4	Eficiência indicada de conversão de combustível.....	49
3.1.6.5	Pressão média efetiva indicada (IMEP)	50
3.1.6.6	Coeficiente de variação da pressão média efetiva indicada (COV_{IMEP})	51
3.1.6.7	Taxa de liberação de calor.....	52
3.1.6.8	Fração de massa queimada	54
3.1.6.9	Duração da combustão e CA50.....	55
3.2	Metodologia numérica.....	56

4	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	58
4.1	Resultados experimentais	58
4.2	Resultados Numéricos	73
5	CONCLUSÕES.....	77
6	BIBLIOGRAFIA.....	79

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Danos causados pelo knock em componentes do motor [Wang et al., 2014].....	11
Figura 2.2	Intensidade do knock para 100 ciclos [Adaptado de Heywood, 1988]..	12
Figura 2.3	Estruturas químicas do isooctano (a) e do n-heptano (b).....	13
Figura 2.4	Knock convencional e Super-Knock. [Adaptado de Wang, et. al., 2017].....	16
Figura 2.5	Molécula de isooctano com identificação dos carbonos.....	22
Figura 2.6	Principais caminhos na oxidação do isooctano [Adaptado de He et al., 2014].....	23
Figura 2.7	Principais caminhos de oxidação do n-heptano [Adaptado de Zhang et al., 2016].....	24
Figura 2.8	Atraso de ignição para misturas estequiométricas de isooctano e n-heptano em diferentes números de octanos (RON) a 40 bar [Pepiot, P.].....	26
Figura 2.9	Ilustração das duas zonas do modelo e do deslocamento da frente de chama [Adaptado de Wang et al., 2017].....	28
Figura 2.10	Curva característica da fração de massa queimada.....	28
Figura 3.1	Foto do motor CFR utilizado nos testes.....	31
Figura 3.2	Coletor de admissão utilizado nos testes.....	32
Figura 3.3	Sistema de medição do consumo de combustível.....	35
Figura 3.4	Representação da bancada experimental utilizada nos testes.....	36
Figura 3.5	Painel frontal do Labview utilizado para monitoramento dos testes.....	38
Figura 3.6	Ciclos de pressão no domínio do tempo, (a) sem knock e (b) com knock.....	41
Figura 3.7	Espectros das frequências para os casos a) sem knock e b) com knock.	42
Figura 3.8	Sinal de pressão da câmara de combustão filtrado na faixa de 4 kHz a 14 kHz.....	44
Figura 3.9	Curvas de probabilidade seguindo a distribuição log-normal dos MAPOS.....	45

Figura 3.10	Distribuição acumulada lognormal dos MAPOs.....	46
Figura 3.11	Gráfico de pressão por volume do cilindro.....	48
Figura 3.12	Liberação de calor mostrando efeitos da transferência de calor, fendas e ineficiência de combustão [Adaptado de Heywood, 1988].....	53
Figura 3.13	Fração de massa queimada versus ângulo de virabrequim.....	54
Figura 4.1	Distribuição dos MAPOs ao longo dos 200 ciclos adquiridos. Combustível I100H0; RC = 16; PIs = 2°, 4°, 5° e 6° APMS.....	59
Figura 4.2	Distribuição dos MAPOs ao longo dos 200 ciclos adquiridos. Combustível I80H20; RC = 8; PIs = 16°, 18°, 19° e 20° APMS.....	60
Figura 4.3	Percentual de ciclos que apresentaram MAPO > 0,5 bar em cada ponto testado.....	61
Figura 4.4	Fator de knock (FK) pelo ponto de ignição (PI) para cada razão de compressão e cada combustível testado.....	63
Figura 4.5	Mapas de IMEP [bar] em função da razão de compressão e do ponto de ignição para cada mistura.....	66
Figura 4.6	CA 50% [° DPMS]: Posição do virabrequim para 50% da massa de combustível queimada.....	68
Figura 4.7	Mapas de eficiência indicada de ciclo [%] em função da razão de compressão e do ponto de ignição para cada mistura.....	70
Figura 4.8	Mapas de COVIMEP [%] em função da razão de compressão e do ponto de ignição para cada mistura.....	72
Figura 4.9	Curva de fração de massa queimada utilizada no modelo computacional.....	73
Figura 4.10	Ângulo de virabrequim e fração de massa não queimada no momento da autoignição para diferentes misturas de isooctano e n-heptano.....	74
Figura 4.11	Simulação da evolução das principais espécies químicas ao longo da combustão na zona não queimada para diferentes misturas de isooctano e n-heptano.....	76

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Principais parâmetros de teste para as metodologias MON e RON.....	14
Tabela 2.2	Varição do ponto de ignição com a altura do cilindro no método MON.....	15
Tabela 2.3	Coefficientes para algumas reações de H ₂ -O ₂ [Adaptado de Turns, 2012].....	19
Tabela 2.4	Organização das espécies e reações do mecanismo R.1-R.4 [Turns, 2012].....	21
Tabela 3.1	Características do motor CFR utilizado nos testes.....	30
Tabela 3.2	Pontos de operação testados (para todos os pontos: Razão ar/combustível = 1; Rotação = 1080 rpm; Pressão de combustível = 3 bar; Temperatura do líquido de arrefecimento = 90±1 °C).....	40
Tabela 3.3	Poder calorífico inferior dos combustíveis utilizados nos testes.....	50

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

IEA	International Energy Agency
FGM	Flamelet Generated Manifolds
EGR	Exhaust Gas Recirculation
SKD	Stochastic Knock Detection
KI	Knock Intensity
CFR	Cooperative Fuel Research
MON	Motor Octane Number
RON	Research Octane Number
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
IVC	Intake Valve Close
EVO	Exhaust Valve Open
ECU	Electronic Control Unit
APMS	Antes do Ponto Morto Superior
DPMS	Depois do Ponto Morto Superior
FFT	Fast Fourier Transform
MAPO	Maximum Amplitude of Pressure Oscillation
FK	Fator de Knock
RC	Razão de Compressão
PI	Ponto de Ignição
RPM	Rotações por Minuto
LHV	Lower Heating Value
CA	Crank Angle
MFB	Mass Fraction Burned
MBT	Maximum Brake Torque
PFI	Port Fuel Injection

1 INTRODUÇÃO

A preocupação mundial em relação às consequências das emissões de gases de efeito estufa tem levado diversos países a adotarem legislações de emissões veiculares progressivamente mais rigorosas, acarretando mudanças no segmento automotivo. Tendências atuais apontam para uma sucessiva eletrificação dos veículos automotores. Segundo Wang et al., 2017, projeções da Agência Internacional de Energia (IEA - *International Energy Agency*) indicam que em 2020, entre veículos de serviços leves e carros de transporte de pessoas, 70% usarão motores a gasolina e em 2050, 58% dos carros de transporte de pessoas ainda usarão motores de combustão interna dentre os quais 85% serão veículos híbridos.

Carros totalmente elétricos não produzem poluentes na exaustão tais como os carros movidos por motores de combustão, porém as emissões de CO₂ associadas a eles dependem da sua fonte da energia elétrica. Segundo Wu et al., 2017, principalmente nos países em desenvolvimento onde as redes de transmissão são menos eficientes e cuja matriz elétrica depende de fontes de energia fóssil, como termelétricas movidas a carvão mineral ou gás natural, as emissões associadas a um carro elétrico são maiores do que as associadas à um veículo movido por motor de combustão interna. Além disso, o processo de produção das baterias envolve altos níveis de emissões de gases de efeito estufa que devem ser considerados no cálculo das emissões de poluentes. Nestas situações os veículos híbridos podem ser uma solução mais viável pois requerem capacidade de armazenamento de energia menor, portanto menos baterias, e possibilitam o uso de um motor de combustão interna que trabalha intermitentemente e próximo de sua máxima eficiência.

Desta forma, mesmo com a tendência de eletrificação dos veículos, estima-se que o uso dos motores de combustão interna em grande escala tende a perdurar por muitos anos e que esforços para torná-los mais eficientes ainda são importantes para reduzir as emissões de gases nocivos ao meio ambiente e atender legislações ambientais atuais e futuras. Um dos principais limitantes do aumento da eficiência dos motores de ignição por centelha é o knock.

O knock é um fenômeno de combustão anormal que pode ocorrer em motores de combustão interna. Trata-se de uma onda de pressão que se origina da elevação local de pressão causada pela autoignição da fração de mistura não queimada dentro do cilindro. Após sua origem ela passa a trafegar pela câmara de combustão na velocidade local do som refletindo

nas paredes do cilindro e causando oscilações na pressão da câmara. Em determinadas condições a amplitude das oscilações são muito elevadas e produzem um ruído metálico que se propaga pela estrutura do motor. Este ruído soa como uma batida (do inglês, *knock*) metálica decorrente da vibração do bloco em sua frequência natural o que dá origem ao nome do fenômeno. Este é um fenômeno prejudicial aos componentes do motor nos quais pode causar danos que inviabilizam seu funcionamento.

O knock é considerado um dos maiores obstáculos no aumento da eficiência dos motores de combustão interna porque limita o aumento da razão de compressão e o uso do ponto de ignição ótimo, fatores essenciais para a elevação da eficiência térmica. Isso decorre de que em elevadas razões de compressão a tendência à autoignição da fração de mistura não queimada é maior pois as temperaturas dentro do cilindro são maiores, elevando também a tendência de ocorrência do knock.

Nas últimas décadas tem ocorrido uma tendência na redução do tamanho e peso dos motores de combustão, denominado na indústria automotiva de *downsizing*. Para não reduzir excessivamente a potência desses motores, naturalmente ocorre um aumento na densidade de potência que normalmente é obtida com um incremento da pressão de admissão do motor através do uso de turbocompressores. Com esse arranjo, uma porção maior de ar é admitida no cilindro aumentando a densidade dos gases e os níveis de pressão durante a combustão. Esse fator, além de aumentar a tendência, deu origem a um novo tipo de knock, o super-knock [Kalghatgi et al., 2009]. Neste novo fenômeno, o pico e as oscilações de pressão são tão elevados que um único evento pode danificar instantaneamente o motor. Conforme aponta Wang et al., 2017, a amplitude na oscilação de pressão do super-knock chega a ser uma ordem de magnitude maior que a do knock convencional.

Desse modo, saber as condições que levam à ocorrência de knock, em quais pontos de operação ele tende a ocorrer e as estratégias para mitigá-lo são importantes no desenvolvimento de motores de combustão interna. Além disso, desenvolver a capacidade de prever essas condições é um aspecto fundamental para reduzir custos e tempo de desenvolvimento de novos produtos. Modelos computacionais tem sido objeto de diversos estudos em busca de uma previsão rápida e confiável do knock. Li et al., 2017, observaram que, em sua maioria, esses modelos são baseados na previsão da autoignição da mistura não queimada usando mecanismos

de cinética química de baixa temperatura ou modelos fenomenológicos baseados na expressão de Arrhenius.

Dada a importância do entendimento do knock para a constante evolução dos motores de combustão interna, este estudo apresenta uma investigação do ponto de vista experimental e computacional com o intuito de obtenção de uma compreensão mais aprofundada do fenômeno.

1.1 Estado da Arte

Mesmo sendo investigado há um longo tempo, o knock ainda é amplamente estudado pois representa uma barreira ao desenvolvimento dos motores de combustão interna. Entender melhor esse fenômeno, poder prevê-lo e encontrar estratégias para mitigá-lo são fundamentais para o avanço da eficiência nos motores.

Os modelos computacionais são ferramentas importantes para aumentar a previsibilidade do knock. Em busca desse objetivo diversos autores vêm estudando variados modelos computacionais, dentre os quais, o uso de mecanismos de cinética química para simular o processo de combustão e detectar uma possível autoignição da fração de mistura não queimada é bastante comum. Quando se trata de simulação em CFD, o uso de modelos cinéticos detalhados demanda excessivo tempo computacional. Para contornar essa limitação, uma estratégia muito utilizada é a de reduzir o mecanismo de forma que contenha apenas as reações elementares mais importantes para o processo de oxidação do combustível em questão. Wang et al., 2017, desenvolveu um modelo de cinética química de 22 espécies e 21 reações para simular a oxidação de hidrocarbonetos. Aplicado em simulação CFD, o gasto de tempo computacional utilizando o modelo cinético reduzido comparado ao detalhado foi 90% menor e manteve boa concordância nos resultados de pressão de cilindro e de distribuição de espécies importantes para a análise de knock como o CHO e o OH.

Já Goryntsev et al., 2019, usou a técnica FGM (*Flamelet-Generated Manifolds*) de Oijen e Goey et al., 2000, para reduzir o tempo de processamento. Nessa técnica a combustão é pré-processada, regida por um mecanismo de cinética química, e os resultados são armazenados em tabelas. Durante a simulação as tabelas são acessadas para suprir os dados da combustão poupando esforço e tempo computacional na solução. Goryntsev et al., 2019, utilizou a técnica em um modelo CFD de um motor de ignição por centelha alimentado por gasolina visando

prever a ocorrência de knock. Segundo seus resultados, o momento de início de knock é bem representado usando a técnica FGM mostrando que ela tem alto potencial de uso em motores de combustão interna. Além disso, através dela é possível representar detalhadamente o processo de combustão abrindo a possibilidade para estudos de emissões através da técnica FGM.

Como vimos, os modelos tridimensionais requerem muito esforço computacional para serem resolvidos e o uso de estratégias para redução de tempo computacional são comuns. O uso de modelos unidimensionais e zerodimensionais é mais viável para aplicações que requerem agilidade e baixo custo.

Parra e Felipe, 2018, utilizaram um modelo de duas zonas zerodimensional acoplado a um mecanismo de cinética química para detectar a autoignição da mistura não queimada em um motor e ignição por centelha. Eles avaliaram cinco modelos de transferência e calor e concluíram que os melhores resultados de previsão do knock foram obtidos ao usar os modelos propostos por Sitkei e Ramanaiah, 1972, e por Annand, 1963. Além disso, eles avaliaram a influência do ponto de ignição, razão de compressão, razão de equivalência e temperatura de admissão observando que o modelo representava muito bem as variações na tendência de ocorrência do knock.

Miyoshi, 2017, implementou o modelo zero dimensional proposto por Noda et al., 2004, no software Chemkin-Pro e utilizou um mecanismo de cinética química com cinco componentes para simular a gasolina e detectar o knock baseado na autoignição da mistura não queimada. Conforme observado por ele, o modelo zero dimensional não pôde prever o knock quantitativamente, mas, acoplado a um mecanismo de cinética química, pode ser uma poderosa ferramenta para o desenvolvimento de novas tecnologias.

Bozza et al., 2019, verificaram a possibilidade de usar a técnica de tabulação de dados em um modelo zerodimensional com o objetivo de obter uma ferramenta de predição de knock rápida e precisa. Duas tabelas foram geradas, uma em um reator homogêneo à volume constante e outra em um reator homogêneo à pressão constante, armazenando as informações da combustão. Dois modelos foram criados no GT-Power. Em um deles a combustão foi resolvida pelo próprio modelo através do mecanismo de cinética química e, no outro, o software acessava as tabelas previamente geradas. O modelo que acessou as tabelas geradas pelo reator à pressão constante retornou melhores resultados. Em altas cargas os valores de intensidade de knock

foram subestimados, porém o ponto de ignição limite para ocorrência do knock pôde ser identificado com boa precisão. O tempo computacional utilizando a técnica de tabulação reduziu em cerca de 10 vezes quando comparado ao modelo que resolveu o mecanismo de cinética química durante a solução.

Como são muitos os fatores que afetam a ocorrência de knock, todos esses modelos são boas ferramentas para estudar estratégias que venham a atenuar sua ocorrência. Kim et al., 2019, estudaram a eficácia no uso de recirculação de gases de exaustão (EGR - *Exhaust Gas Recirculation*) impondo dados experimentais em um modelo de motor de ignição por centelha do Chemkin. Os experimentos mostraram que a eficácia de N₂ e CO₂ para suprimir o knock varia com o tipo de combustível e a razão de compressão. Os processos de autoignição da zona não queimada foram estudados numericamente usando um mecanismo detalhado de cinética química e a partir deles foi possível explicar as tendências encontradas experimentalmente.

Shao e Rutland, 2015, estudaram diferentes métodos para supressão do knock em um motor de pequeno porte Rotax-914 operando com combustível de aviação JET - 8. O estudo foi realizado numericamente em um modelo CFD do software KIVA-3V e no software Chemkin, tanto em um reator perfeitamente misturado como em um queimador livre de chama pré misturada, ambos governados por um mecanismo cinético químico. Resultados mostraram que adição de combustíveis gasosos como hidrogênio e gás natural podem aumentar a resistência ao knock em algumas condições. A adição de gás natural foi considerada uma boa maneira de suprimir o knock pois, segundo as simulações, ele aumenta o atraso de ignição da fração de mistura não queimada. A adição de hidrogênio provoca esse efeito apenas em algumas condições de operação e, portanto, seus efeitos sobre a ocorrência de knock no motor são considerados muito instáveis. As estratégias de injeção direta, recirculação de gases de exaustão e indução de *swirl* também foi investigada por Shao e Rutland, 2015, e todas apresentaram boa capacidade de redução da ocorrência de knock.

Naik et al., 2019, avaliaram a influência de nove componentes aromáticos adicionados ao combustível sobre o tempo de autoignição, velocidade de chama e emissões, através de simulações computacionais zerodimensionais e unidimensionais baseadas em um mecanismo de cinética química. Foi possível tirar conclusões significativas sobre a influência de cada aromático nas emissões e na ocorrência de knock, mostrando a grande utilidade desse tipo de ferramenta computacional nos projetos de desenvolvimento de novos motores.

Além dos estudos numéricos, muitos estudos experimentais são realizados para aumentar o entendimento sobre as características e fatores preponderantes para a ocorrência de knock. Cho et al., 2019, estudaram a influência da razão diâmetro/curso na eficiência e na tendência ao knock. Testes foram realizados em um motor de ignição por centelha para as razões diâmetro/curso 1.0, 0.83 e 0.68 nas rotações de 1500 e 2000 RPM mantendo o volume deslocado constante. Como resultado, razões de diâmetro/curso menores mostraram ter maior resistência ao knock, não apenas por causa das velocidades de queima mais rápidas, mas também devido às menores temperaturas da fração de mistura não queimada. Já as melhores eficiências foram obtidas na relação diâmetro/curso de 0.83 principalmente em condição de carga parcial.

Singh et al., 2019, estudaram o efeito da injeção tardia de diferentes líquidos sobre a pré-ignição. Gasolina foi utilizada como combustível do pulso principal, e os líquidos secundários analisados foram gasolina, etanol, metanol e água, injetados no final do curso de compressão. A injeção de água no final do ciclo de compressão se mostrou a estratégia mais eficaz no resfriamento de carga e conseqüentemente maior supressão na ocorrência de knock.

Pulpeiro et al., 2019, destacaram a característica estocástica do knock relacionada principalmente à variabilidade cíclica inerente aos motores de combustão interna. Em seu estudo ele avaliou a variabilidade cíclica da pressão e o tempo para atingir a autoignição de combustíveis contendo compostos iso-parafínicos, aromático e etanol em sua composição. Os testes foram realizados tanto em um motor CFR como em um motor monocilíndrico com injeção direta. Ele observou que entre os combustíveis testados, os iso-parafínicos tem um comportamento mais determinístico facilitando a identificação das condições que levam ao knock.

Hosogi et al., 2019, mostraram a influência dos depósitos de carbono sobre o pistão na ocorrência de knock através de experimentos realizados em um motor CFR com o pistão sem acúmulos de depósitos e posteriormente com o acúmulo de depósitos. Uma camada de depósitos de 150 μm de espessura resultou em um aumento na temperatura do cilindro devido ao efeito de isolamento térmico nas superfícies do pistão. Em 30° antes do ponto morto superior a diferença foi de aproximadamente 9°C e em 12° antes do ponto morto superior foi de 20°C . Esse efeito de aumento na temperatura dentro do cilindro levou à autoignição antecipada da

fração de mistura não queimada resultando em níveis de knock mais elevados para o motor com depósitos sobre o pistão.

Diversas soluções estão sendo desenvolvidas e/ou aprimoradas visando evitar a ocorrência de knock e possibilitar o aumento da eficiência térmica dos motores de combustão interna. A razão de compressão variável é conceito um antigo pois Wallace e Lu, em 1964, já apresentavam um conceito para alteração da razão de compressão de um motor. Porém, com o recente desenvolvimento da eletrônica embarcada e com processos de controle automatizados, o emprego desse conceito em motores comerciais tornou-se viável e por isso tem sido objeto de estudo de muitos pesquisadores em busca de maiores eficiências dos motores de combustão interna. Nos motores tradicionais a razão de compressão é limitada para que o knock não ocorra em altas cargas. Quando o motor está em condições de carga parcial ou em baixas cargas, como em tráfego urbano, ele opera em uma razão de compressão efetiva muito baixa pois há pouca entrada de ar no cilindro. A tecnologia de razão de compressão variável permite aumentar a razão de compressão em condições de baixa eficiência, e diminuí-la em condições mais propensas ao knock, criando uma faixa de operação de alto desempenho mais ampla. Hoje há diferentes propostas de mecanismos que variam a razão de compressão e diversos estudos são realizados para melhorar a aplicabilidade da tecnologia bem como aumentar os benefícios que ela pode trazer [Mamala et al., 2019; Mendler e Graver, 2002; Romero e Henao, 2019; Shi et al., 2019; Barazzoni et al., 2019; Mane et al., 2019].

Dessa forma, uma caracterização detalhada da ocorrência de knock com a variação da taxa de compressão é um tema pertinente no contexto atual. A realização desse estudo em um motor CFR, que é ainda o padrão comercial para a caracterização de combustíveis, pode trazer importantes contribuições para a compreensão tanto do fenômeno quanto do próprio equipamento.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo geral

O principal objetivo deste trabalho é analisar o efeito da composição do combustível de referência padrão em índices estatísticos de detecção de knock em um motor CFR.

1.2.2 Objetivos específicos

- Adaptar e instrumentar um motor CFR com uma unidade eletrônica programável para aumentar o controle do operador sobre o ponto de ignição e a injeção de combustível.
- Montar um setup experimental para aquisição dos dados de pressão de cilindro em função do ângulo de virabrequim do motor CFR.
- Identificar as frequências de oscilação das ondas de pressão do knock no motor CFR.
- Detectar e calcular a intensidade de knock através da pressão de cilindro do motor, comparando o método estocástico de detecção de knock (SKD - *Stochastic Knock Detection*) com o método de intensidade de knock (KI - *Knock Intensity*).
- Realizar testes com misturas de isooctano (I) e n-heptano (H) nas proporções volumétricas I100H0, I80H20, I60H40, I40H60, I20H80 e I0H100 em diversas razões de compressão. Em cada razão de compressão avançar o ponto de ignição gradativamente até a ocorrência do knock.
- Analisar os parâmetros de desempenho e a intensidade do knock (quando ocorrer) para cada ponto de operação testado.
- Realizar simulações de cinética química no software Chemkin utilizando um modelo de motor de ignição por centelha com câmara de combustão de duas zonas, visando avaliar a tendência de ocorrência de knock para as misturas de isooctano e n-heptano testadas.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Knock

No motor de combustão interna de ignição por centelha uma mistura homogênea de ar e combustível é admitida para dentro do cilindro e, após o fechamento da válvula de admissão, o pistão inicia a compressão da mistura. Quando a vela de ignição dispara uma centelha, uma frente de chama começa a se propagar e divide a câmara de combustão em uma zona queimada e uma zona não queimada. A zona não queimada está à frente da chama e contém os reagentes ainda não consumidos. A zona queimada está atrás da chama e contém os produtos da combustão. A pressão e a temperatura da câmara de combustão aumentam gradativamente devido à energia liberada pela oxidação do combustível. Na zona não queimada algumas reações elementares começam a acontecer com o aumento da temperatura e, caso esse aumento seja suficiente, toda a fração de reagentes restante entra em autoignição gerando uma liberação de energia química praticamente instantânea dessa porção de combustível. Esse evento provoca uma rápida elevação local de pressão gerando uma onda que passa a se propagar pela câmara de combustão. Como ela reflete nas paredes do cilindro e no pistão, gera uma oscilação de pressão em todos os pontos da câmara de combustão.

A amplitude da oscilação é diretamente proporcional à quantidade de combustível que entra em autoignição. Quando a amplitude atinge valores mais elevados ouve-se no motor um ruído metálico ao qual é dado o nome de knock. Embora para flutuações menores não seja possível ouvir esse ruído, o termo continua sendo usado para essas pequenas oscilações de pressão (knock leve).

Desta forma, a ocorrência de knock está associada às condições de ocorrência da autoignição da fração de mistura não queimada. Quando a temperatura não aumenta o suficiente para a ocorrência da autoignição, a chama se propaga varrendo todo o volume da câmara até extinguir-se nas suas paredes e então a combustão é dita normal. Segundo Heywood, 1988, a ocorrência do knock está associada ao ponto de ignição do motor, chamado então de “*spark-knock*”, ou devido à presença de pontos quentes na câmara de combustão, chamado de “*knocking surface ignition*”.

No *spark-knock* o ponto de ignição é avançado demasiadamente e a propagação de chama inicia muito antes de o pistão alcançar o ponto morto superior e, devido à maior compressão dos gases, a temperatura da fração não queimada aumenta até ocorrer sua autoignição. Se o ponto de ignição avançar ainda mais, atinge-se a temperatura de autoignição ainda mais cedo e uma porção maior de combustível entra em autoignição aumentando a intensidade do knock. Para mitigar a sua ocorrência basta novamente atrasar o ponto de ignição até cessar o fenômeno.

No caso do *knocking surface ignition* como há a presença de pontos excessivamente quentes na câmara, a combustão pode iniciar em algum desses pontos mesmo antes da vela disparar a centelha, o que se intitula de pré-ignição, ou ainda, após o disparo da centelha um ponto quente pode originar uma segunda frente de chama, que é denominado pós-ignição. Como na pré-ignição a combustão inicia mais cedo e na pós-ignição o combustível é consumido em uma taxa mais elevada, em ambos os casos a temperatura de zona não queimada será maior em relação à uma combustão que ocorresse normalmente devido à maior compressão dos gases. Assim, a tendência da autoignição da mistura não queimada e, por conseguinte, da ocorrência de knock, é maior.

Neste trabalho o termo knock será utilizado genericamente para se referir ao fenômeno de oscilação da pressão na câmara de combustão sem considerar a origem da autoignição.

Quando há ocorrência de knock, os picos de pressão e temperatura dos gases são mais elevados o que aumenta a transferência de calor para as paredes do cilindro deixando-as mais quentes. Se as temperaturas subirem o suficiente para iniciar as pré-ignições em pontos quentes, há o risco de entrada em um efeito cascata entre pré-ignição e knock pois uma parede mais quente significa que a pré-ignição do próximo ciclo pode ocorrer mais cedo e aumentar a intensidade do knock que por sua vez aumenta mais a temperatura da parede do cilindro iniciando a combustão do próximo ciclo ainda mais cedo aumentando mais a intensidade do knock e assim sucessivamente. Esse efeito em cascata elevará demasiadamente a temperatura dos componentes do motor podendo danificá-los seriamente em apenas alguns minutos.

A exposição dos componentes a longos períodos sob ocorrência de knock também pode levá-los à falha por fadiga devido aos elevados impactos que eles sofrem durante o deslocamento da onda de pressão. A Figura 2.1 mostra componentes de motores danificados pela ocorrência de knock.



Figura 2.1 - Danos causados pelo knock em componentes do motor [Wang et al., 2014].

Como vimos, sob condições de knock a rejeição de calor para as paredes do cilindro e para o pistão aumenta, resultando em uma redução na eficiência de ciclo. Além disso, o aumento da razão de compressão do motor, que é uma das estratégias para aumentar a sua eficiência térmica, também aumenta a probabilidade de ocorrência de knock já que a temperatura de autoignição do combustível é alcançada mais cedo. Em suma, pode-se dizer que o knock é um limitante para o aumento da eficiência de um motor de combustão.

Por esse motivo e pelos possíveis danos mecânicos relatados, o knock deve sempre ser evitado e compreender as suas causas torna-se fundamental para poder evitá-lo. As seções a seguir tratam do efeito da variabilidade cíclica na ocorrência e detecção do knock bem como da importância dos combustíveis no estudo do knock, visto que esses possuem diferentes propensões para entrar em autoignição.

2.1.1 O efeito da variabilidade cíclica na ocorrência de knock

A variabilidade cíclica é um fator importante no estudo do knock. Ela é inerente ao funcionamento do motor e até pode ser reduzida, mas não é possível eliminá-la totalmente. Segundo Heywood, 1988, sua origem principal é a aleatoriedade da movimentação dos fluidos durante o ciclo do motor e as pequenas variações involuntárias da quantidade de combustível injetado em cada ciclo que alteram ciclo a ciclo a razão ar/combustível dentro do cilindro e consequentemente a taxa com que os reagentes são consumidos.

No processo de admissão há variação no volume de ar admitido em cada ciclo o que varia a razão ar/combustível. Adicionalmente, no momento da ignição, a razão ar/combustível

na região de início da combustão (próxima à vela em motores de ignição por centelha) pode apresentar variações espaciais já que a homogeneidade da mistura não é perfeita, levando à uma estratificação da velocidade de chama e liberação de calor variáveis de ciclo à ciclo. No período de exaustão, o processo de limpeza do cilindro deixa porções variadas de gases queimados em cada ciclo o que irá afetar de forma distinta a combustão do ciclo seguinte. Além disso, a temperatura da parede do cilindro varia em cada ciclo alterando também a taxa de transferência de calor, a temperatura dos reagentes dentro do cilindro e, conseqüentemente, afetando a combustão de cada ciclo.

Todos esses fatores citados influenciam a velocidade com que o combustível é consumido. Assim, em condições próximas à ocorrência do knock, os ciclos de menor taxa de consumo de combustível, principalmente no início da combustão, não apresentam a ocorrência do fenômeno, pois os picos de temperatura são menores e não alcançam a temperatura de autoignição. Já nos ciclos em que a combustão se desenvolve mais rapidamente, a temperatura atinge valores suficientes para a autoignição da mistura. Em geral, quanto mais rápido a combustão se desenvolver, maior fração de combustível sofrerá a autoignição e os níveis de knock serão maiores. Sendo assim, a tendência é que em cada ciclo uma fração distinta de combustível entre em autoignição e provoque uma intensidade de knock diferente. Esses fatores conferem ao knock uma característica estocástica visto que a ocorrência de knock em cada ciclo do motor, depende de fatores dificilmente controláveis.

A Figura 2.2 de Leppard, 1982, foi usada por Heywood, 1988, para mostrar a variação da intensidade do knock em 100 ciclos consecutivos de um motor.

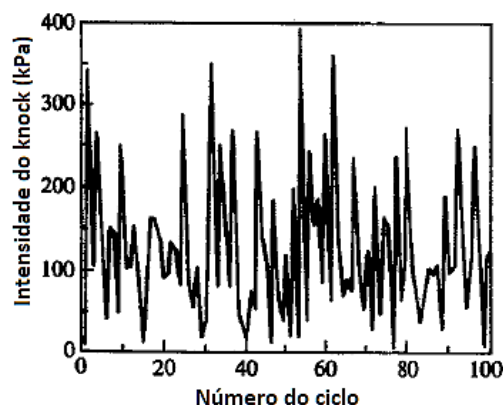


Figura 2.2 - Intensidade do knock para 100 ciclos [Adaptado de Heywood, 1988].

O valor da intensidade de knock no eixo vertical (em kPa) foi obtido pela máxima amplitude da oscilação da pressão em cada um dos 100 ciclos. Na Seção 3.1.6.1 será abordado em detalhes esse método de detecção da máxima amplitude da oscilação de pressão. Observa-se que nestes 100 ciclos consecutivos foram medidas desde oscilações de pressão próximas de zero, ou seja, ciclos sem ocorrência de knock, até oscilações de pressão acima de 300 kPa que geraram knock audível (considerado knock intenso). Além disso, observamos ciclo a ciclo uma alta variabilidade e ausência de padrão na intensidade de knock evidenciando a natureza estocástica do knock, anteriormente citada.

2.1.2 O efeito do combustível na ocorrência de knock

A tendência de autoignição dos combustíveis está ligada à estrutura química de suas moléculas. Algumas possuem ligações mais fracas que desencadeiam as reações mais rapidamente. Para aplicação em motores de combustão interna, os combustíveis utilizados como referência de alta resistência ao knock, e baixa resistência ao knock são o isooctano e o n-heptano, respectivamente. A estrutura química de cada um está apresentada nas Figura 2.3 (a) e (b).

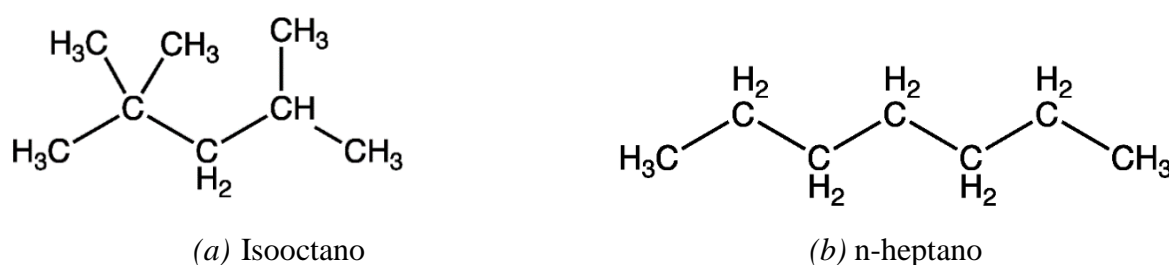


Figura 2.3 - Estruturas químicas do isooctano (a) e do n-heptano (b).

Conforme indica a nomenclatura, o isooctano possui 8 carbonos em sua cadeia e, devido às suas posições, o nome 2,2,4 trimetilpentano também é utilizado. Já o n-heptano possui 7 carbonos e o prefixo “n” significa *normal* o que indica que a cadeia não possui ramificações, os carbonos estão alinhados de forma que apenas duas extremidades são formadas. Nas Seções 2.2.2.1 e 2.2.2.2 são discutidos os mecanismos de oxidação de cada um deles.

Há um teste padrão para medir a tendência dos combustíveis ao knock no qual eles são classificados pelo seu índice de octano. Índices mais elevados significam maior resistência do combustível à autoignição e, em consequência, ao knock. O teste do número de octano de um combustível é realizado em um motor padrão denominado CFR (*Cooperative Fuel Research*). Existem dois métodos para a realização desse teste, o *Motor Octane Number* (MON) [ASTM/D2700 2017] e o *Research Octane Number* (RON) [ASTM/D2699 2017]. Em ambos os métodos é realizada a medição da pressão da câmara de combustão do motor CFR. A razão de compressão do motor é gradativamente aumentada até identificar-se a ocorrência de knock e um dispositivo indicará sua intensidade. Em seguida, misturas de isooctano e n-heptano são testadas na mesma condição que se detectou o knock. Quando a proporção que resulta na mesma intensidade de knock detectada no combustível de teste é encontrada, define-se que o número de octanos do combustível testado é igual à proporção volumétrica de isooctano nessa mistura. Como ao isooctano é atribuído o índice de 100 octanos e ao n-heptano atribui-se zero, quanto maior o número de octanos de um combustível, maior será sua resistência ao knock.

Os principais parâmetros de operação para as metodologias MON e RON estão sumarizados na Tabela 2.1. Para ambas metodologias o lambda sempre é ajustado para maximizar o knock.

Tabela 2.1 - Principais parâmetros de teste para as metodologias MON e RON.

PARÂMETRO DE TESTE	MON	RON
Rotação [RPM]	900 ±9	600 ±6
Temperatura do óleo [°C]	57 ±8	57 ±8
Temperatura do líquido de arrefecimento [°C]	100 ±1,5	100 ±1,5
Temperatura do ar de admissão [°C]	38 ±2,8	52 ±1
Ponto de ignição [°APMS]	14 – 26	13

As principais diferenças são a rotação, temperatura do ar de admissão e o ponto de ignição, que na metodologia RON é fixo em 13° antes do ponto morto superior e na metodologia MON é utilizado um sistema mecânico que varia o ponto de ignição conforme varia a altura do cilindro, ou seja, conforme varia a razão de compressão. O ponto de ignição da metodologia

MON varia de 14° APMS (Antes do Ponto Morto Superior) até 26° APMS e segue os valores apresentados na Tabela 2.2.

Tabela 2.2 - Variação do ponto de ignição com a altura do cilindro no método MON.

ALTURA DO CILINDRO [in]	PONTO DE IGNIÇÃO [° APMS]
0,825	26
0,773	25
0,721	24
0,669	23
0,617	22
0,565	21
0,513	20
0,461	19
0,408	18
0,356	17
0,304	16
0,252	15
0,200	14

É comum ainda, classificar os combustíveis pelo Índice Antiknock onde é necessário realizar o teste tanto pelo método RON quanto pelo MON, pois o Índice Antiknock é definido por,

$$\text{Índice Antiknock} = \frac{RON+MON}{2} \quad 2.1$$

Pelo fato de o combustível ser fator determinante para a ocorrência ou não do knock, entender passo a passo como as reações de diferentes combustíveis se desencadeiam ao longo da combustão se tornou importante para estudar e prever esse fenômeno. A área responsável por esse estudo é a cinética química da qual são apresentados, na Seção 2.2, os principais conceitos e fundamentos a serem utilizados nesse estudo.

2.1.3 Super knock

O super-knock é um fenômeno que começou a ser observado nas últimas décadas após a tendência do *downsizing* dos motores de combustão interna onde a necessidade do aumento da densidade de potência levou ao aumento da pressão de turbo e consequente aumento na pressão da câmara de combustão aumentando a tendência ao knock convencional e dando origem ao fenômeno que foi convencionado de super-knock.

O super-knock foi assim chamado devido a elevada amplitude das oscilações de pressão observadas nesse fenômeno que chegam a ser uma ordem de magnitude superior ao knock convencional conforme apresentado por Wang, et. al., 2017, na Figura 2.4. Observa-se que as oscilações para o knock convencional são de aproximadamente 5 bar (0,5 MPa) enquanto no super-knock a oscilação atingiu 120 bar (12 MPa).

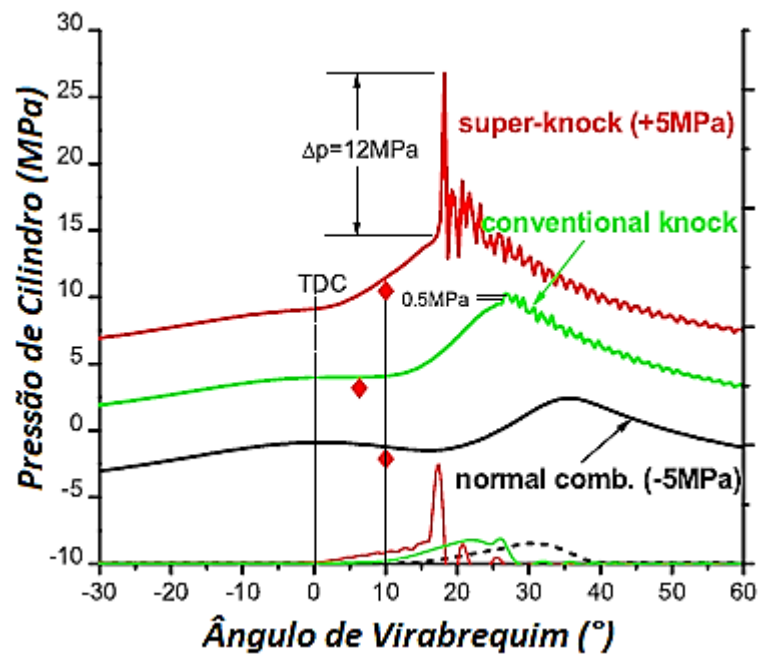


Figura 2.4 - Knock convencional e Super-Knock. [Adaptado de Wang, et. al., 2017]

Essas amplitudes tão elevadas dão ao superknock a característica de ser prejudicial ao motor com muita rapidez sendo necessários poucos, e em alguns casos um único evento para danificar o motor. Além disso, é um fenômeno muito imprevisível, fator que dificultou o estudo

do fenômeno pois, ao contrário do knock convencional que pode ser observado quando alterados parâmetros específicos de funcionamento do motor como razão de compressão, ponto de ignição, temperatura de admissão ou até mesmo o combustível utilizado, para o super knock as condições para a sua ocorrência não são tão bem definidas sendo por isso mais difícil adquirir dados de um evento de super-knock.

Juntamente com o super knock, a teoria das detonações voltou a ganhar destaque em artigos científicos com o objetivo de explicar esse novo fenômeno. Heywood, 1988, já menciona que as duas principais teorias para explicar a ocorrência do knock convencional são as teorias da detonação e da autoignição. A primeira teoria postula que, sob condições de knock, a frente de chama é acelerada para velocidades sônicas e consome os reagentes a uma taxa muito mais rápida do que ocorreria com velocidades normais de chama. Segundo essa teoria, a rápida liberação de energia química provoca um aumento local de pressão que gera a onda de pressão que se propaga pela câmara de combustão. Ainda segundo Heywood, 1988, as evidências apontavam que o knock se iniciava a partir de uma autoignição na região de mistura não queimada o que provoca um rápido consumo do combustível nas regiões adjacentes e assim origina uma elevação local de pressão que dá origem a onda de pressão que passa a trafegar na câmara de combustão e ocasionar a oscilação de pressão característica deste fenômeno.

Porém, a teoria da detonação voltou a ser utilizada para explicar o super-knock. Wang et. al., 2017, apresentam um estudo onde imagens da combustão de um evento de super-knock foram capturadas concomitantemente com a pressão na câmara de combustão. A análise do evento de super-knock foi dividida em 3 partes. Na primeira parte há a deflagração de uma chama iniciada randomicamente por uma partícula ainda antes da ocorrência da centelha. Essa partícula aparece no centro da câmara de combustão e ignita o combustível iniciando uma chama subsônica que consome parte do combustível. A energia química liberada provoca uma expansão térmica da região queimada que por sua vez comprime a região não queimada provocando um aumento de sua pressão e temperatura.

Na segunda fase três frentes de chama são iniciadas na região de mistura não queimada perto das paredes. Como a região central já foi consumida pela primeira chama, essas novas chamas consomem os reagentes das regiões periféricas da câmara de combustão em uma velocidade muito alta. Uma onda de propagação viaja a 3080 m/s pela região não queimada

passando pelo transdutor de pressão e gerando um pico de pressão de 8 MPa, identificado pelo transdutor de pressão.

Na terceira fase essa onda de pressão passa a se propagar pela câmara de combustão e refletir nas paredes do cilindro a uma velocidade de 1155 m/s que corresponde a velocidade do som em uma zona de gás queimada. A frequência de oscilação é de 11kHz.

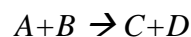
Mesmo que a teoria das detonações apresentada vem sendo utilizada para explicar o fenômeno mais recente denominado super-knock, deste trabalho utilizaremos a teoria da autoignição pois será trabalhado apenas com o knock convencional, fenômeno para o qual a teoria da autoignição é mais comumente encontrada na literatura.

2.2 Cinética química

2.2.1 Reações elementares

A cinética química é um campo da físico-química dedicado ao estudo das reações elementares e suas taxas. Muitos avanços ocorrem no sentido de identificar os principais caminhos percorridos pelos reagentes até se transformarem em produtos, além de determinar as taxas com que ocorrem.

Uma reação onde duas moléculas arbitrárias colidem e reagem para formar outras duas é uma reação elementar bimolecular e pode ser representada por,



Essa reação vai ocorrer em uma determinada taxa ($d[A]/dt$) que é proporcional ao coeficiente de taxa bimolecular ($k_{bimolecular}$) e às concentrações dos reagentes $[A]$ e $[B]$, ou seja,

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_{bimolecular}[A][B] \quad 2.2$$

O sinal negativo indica que há consumo da espécie A . O coeficiente de taxa (k) é baseado na teoria das colisões moleculares e depende de um fator proporcional à ocorrência de colisões

e da probabilidade de uma colisão resultar em uma reação. Ele pode ser expressado pela forma de Arrhenius,

$$k(T) = A \exp\left(\frac{-E_a}{R_u T}\right) \quad 2.3$$

onde A é um fator de frequência ou fator pré-exponencial, dependente da temperatura (T) pois, segundo a teoria das colisões, o incremento da temperatura aumenta a velocidade média das partículas e, por consequência, aumenta a probabilidade de ocorrência das colisões. A probabilidade de uma colisão resultar em uma reação é expressa pelo termo exponencial, o qual depende da energia de ativação, E_a . Ela representa o nível de energia necessário para ocorrer a reação. A Equação 2.3 é reescrita em função de três parâmetros empíricos (A , b e E_a), como

$$k(T) = AT^b \exp\left(\frac{-E_a}{R_u T}\right) \quad 2.4$$

Esses parâmetros são obtidos e ajustados experimentalmente e então tabelados para serem usados no cálculo do coeficiente de reação. A Tabela 2.3 mostra um exemplo dos parâmetros tabelados para obtenção do coeficiente de reação para algumas reações de H_2-O_2 .

Tabela 2.3 - Coeficientes para algumas reações de H_2-O_2 [Adaptado de Turns, 2012].

Reação	A ((cm ³ /gmol) ⁿ⁻¹ /s)	b	E_a (kJ/gmol)	Faixa de Temperatura (K)
$H + O_2 \rightarrow OH + O$	$1,2 E^{17}$	-0,91	69,1	300 - 2500
$OH + O \rightarrow O_2 + H$	$1,8 E^{13}$	0	0	300 - 2500
$O + H_2 \rightarrow OH + H$	$1,5 E^7$	2	31,6	300 - 2500
$OH + H_2 \rightarrow H_2O + H$	$1,5 E^8$	1,6	13,8	300 - 2500
$H + H_2O \rightarrow OH + H_2$	$4,6 E^8$	1,6	77,7	300 - 2500
$O + H_2O \rightarrow OH + OH$	$1,5 E^{10}$	1,14	72,2	300 - 2500

2.2.2 Mecanismos de cinética química

Um mecanismo de cinética química pode ser definido como uma sequência de reações elementares que levam determinados reagentes até seus produtos finais. Esses mecanismos são escritos na forma de uma lista de reações elementares acompanhadas de seus respectivos parâmetros necessários no cálculo dos coeficientes de reação.

No capítulo anterior tratamos das taxas de reações elementares de um único passo. Na Equação 2.2 foi definida a notação para o cálculo da taxa de reação de uma espécie química em uma reação elementar. Agora, para os mecanismos de múltiplos passos, é necessário formular uma notação que englobe cada espécie em cada uma das reações elementares do mecanismo. Consideremos como exemplo o mecanismo incompleto do H_2 - O_2 abaixo (Equação R.1 a R.4) observando os sentidos principal e reverso de cada reação, representados pelo símbolo \rightleftharpoons , onde teremos:



Os coeficientes principal e reverso de reação (k_f e k_r respectivamente) são calculados conforme a Equação 2.4.

A taxa de reação de cada espécie j , onde $j = 1, 2, \dots, N$, pode ser denotada por:

$$\frac{d[X_j]}{dt} = \sum_{i=1}^L v_{ji} q_i \quad 2.5$$

onde i são as reações elementares do mecanismo, com $i = 1, 2, \dots, L$, e v_{ji} é dado por:

$$v_{ji} = v_{ji}'' - v_{ji}' \quad 2.6$$

sendo v_{ji}' os coeficientes estequiométricos dos reagentes e v_{ji}'' os coeficientes estequiométricos dos produtos. Utilizando o mecanismo das Equações R.1 a R.4 como exemplo, definindo as espécies e as reações elementares conforme a Tabela 2.4,

Tabela 2.4 - Organização das espécies e reações do mecanismo R.1-R.4 [Turns, 2012].

j	Espécies	i	Reação
1	O ₂	1	R.1
2	H ₂	2	R.2
3	H ₂ O	3	R.3
4	HO ₂	4	R.4
5	O		
6	H		
7	OH		
8	M		

e utilizando j como as colunas e i como as linhas da matriz, teremos para o mecanismo R.1-R.4

$$v'_{ji} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad v''_{ji} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Por fim, a variável de taxa de progresso (q_i) é definida para cada reação elementar i , por

$$q_i = k_{fi} \prod_{j=1}^N [X_j]^{V'_{ji}} - k_{ri} \prod_{j=1}^N [X_j]^{V''_{ji}} \quad 2.7$$

onde o símbolo Π significa o produto entre os termos da expressão.

Esse equacionamento é útil para resolver mecanismos de múltiplas reações e devido à complexidade que o sistema atinge, é necessário o uso computacional para a tarefa. Alguns mecanismos são constituídos de centenas de espécies e milhares de reações elementares. Quando deseja-se resolver esses mecanismos simultaneamente com as equações de conservação dependentes do tempo, por exemplo, enorme capacidade computacional é necessária. Para diminuir esse esforço computacional é comum separar as reações mais importantes dos mecanismos completos através de uma análise de sensibilidade e com elas formar um mecanismo reduzido. Os aspectos mais importantes da combustão continuam bem perceptíveis, porém alguns detalhes inerentes ao mecanismo complexo não são mais capturados.

2.2.2.1 Mecanismo de oxidação do isooctano

Um dos mecanismos cinéticos mais completo e amplamente utilizado para reproduzir a oxidação do isooctano foi desenvolvido pelo Lawrence Livermore National Laboratory¹ baseado principalmente no mecanismo desenvolvido por Curran et al., 2002. Em seu trabalho eles identificam cada carbono da molécula com uma letra (a , b , c ou d) conforme a Figura 2.5.

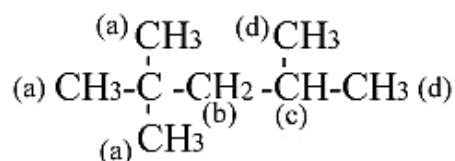


Figura 2.5 - Molécula de isooctano com identificação dos carbonos

¹ Disponível em: <https://combustion.llnl.gov/mechanisms/alkanes/iso-octane-version-3>, acessado em 11/08/2019.

Conforme a nomenclatura indica, o isooctano possui 8 carbonos em sua cadeia. Cinco carbonos compõe a cadeia principal e três carbonos são radicais metil. He et al., 2014, analisaram os principais caminhos na decomposição do isooctano em baixa temperatura utilizando o mecanismo cinético químico desenvolvido pelo Lawrence Livermore National Laboratory, acima mencionado. Eles utilizaram o modelo de motor de combustão interna com ignição de carga homogênea por compressão (HCCI - *Homogeneous charge compression ignition*) do software Chemkin. Neste modelo a mistura ar e combustível vai sendo comprimida e algumas reações elementares começam a ocorrer regidas pelo mecanismo cinético imposto no software. Fazendo um estudo de sensibilidade que aponta as principais reações responsáveis pela oxidação do isooctano em baixa temperatura eles construíram o esquema apresentado na Figura 2.6. Os valores numéricos em cada seta são a propabilidade de uma reação ocorrer. Por exemplo, há 7.1% de chance de uma hidroxila (OH) ligar-se a um hidrogênio do carbono (*b*) formando um H₂O, e mais 4.6% de chance de um hidrogênio qualquer se ligar a um hidrogênio do carbono (*b*) formando um H₂.

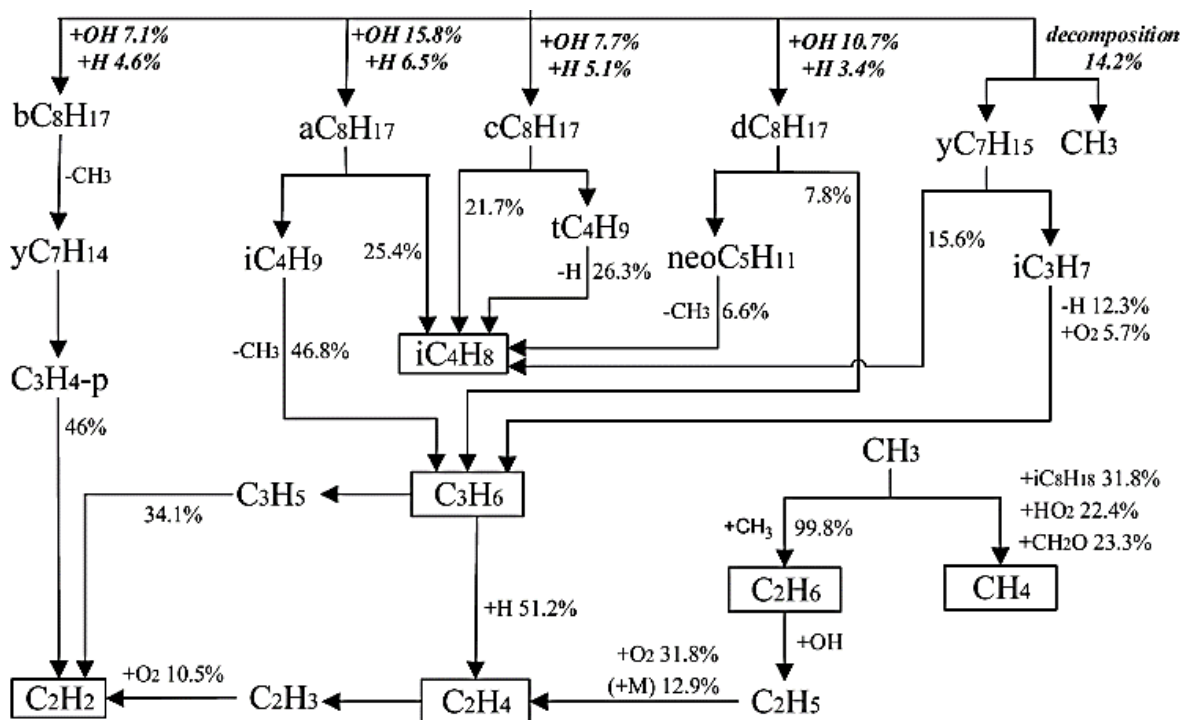


Figura 2.6 - Principais caminhos na oxidação do isooctano [Adaptado de He et al, 2014].

Conforme mostra a análise, há 5 principais caminhos a serem considerados no primeiro passo da oxidação do isooctano. Os quatro primeiros são pela abstração de um hidrogênio da molécula de isooctano. A maior probabilidade de abstração é para algum dos hidrogênios (*a*), seguidos pelo (*d*) depois pelo (*c*) e finalmente pelo (*b*). O quinto provável caminho é pela decomposição da molécula de isooctano pela quebra de uma das metilas (*a*) da cadeia principal.

A espécie intermediária iC_4H_8 é uma das principais visto que quatro dos cinco caminhos apresentados formam um percentual dela. O acetileno (C_2H_2) e o etileno (C_2H_4) também são duas moléculas de interesse em nosso estudo pois elas possuem taxas de reação elevadas o que acelera o processo de oxidação do combustível e pode aumentar a tendência de ocorrência de knock.

2.2.2.2 Mecanismo de oxidação do n-heptano

Conforme foi apresentado na Figura 2.3 *b*), o n-heptano possui 7 carbonos alinhados formando uma cadeia sem ramificações e com apenas duas extremidades. Zhang et al, 2016, desenvolveram um mecanismo cinético para representar a oxidação do n-heptano. O mecanismo foi baseado em medições experimentais e modelos cinéticos antigos, principalmente o modelo proposto por Curran et al., 1998. Os principais caminhos observados na decomposição da molécula são sintetizados na Figura 2.7.

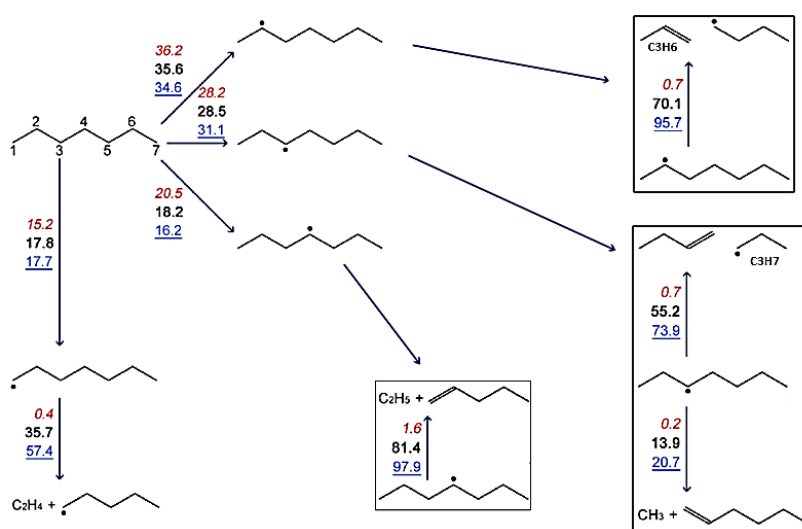


Figura 2.7 - Principais caminhos de oxidação do n-heptano [Adaptado de Zhang et al., 2016].

Os carbonos foram numerados de 1 a 7 conforme indicado no canto superior esquerdo da Figura 2.7 e os valores numéricos representam a contribuição de cada reação na decomposição da molécula. As fontes em vermelho *itálico*, preto **negrito** e azul sublinhado são referentes à oxidação de n-heptano em um reator perfeitamente misturado com mistura estequiométrica para as temperaturas, 650 K, 850 K e 1000 K, respectivamente.

Para todas as temperaturas, as principais reações no primeiro passo são a abstração de um hidrogênio da molécula. A primeira possibilidade discutida é a abstração do carbono número um (ou do número 7, pois são equivalentes) seguido pela quebra da ligação entre o segundo e o terceiro carbono da molécula ocorrendo assim a formação de etileno (C_2H_4). Outro provável caminho é a abstração de um hidrogênio do segundo carbono (ou do sexto, pois são equivalentes) seguido pela quebra da ligação entre o terceiro e o quarto carbono ocorrendo assim a formação de propileno (C_3H_6). O próximo caminho provável abordado se dá pela abstração de um hidrogênio do terceiro carbono (ou do quinto, pois são equivalentes). A partir dessa abstração podem ocorrer duas quebras diferentes de ligações da molécula. Em uma delas, a ligação entre os carbonos 4 e 5 se quebra formando C_3H_7 e na outra, a ligação entre os carbonos 1 e 2 se quebra e dá origem ao CH_3 . Por fim, o último caminho apresentado parte da abstração de um hidrogênio do quarto carbono seguida pela quebra da ligação entre o segundo e o terceiro carbono originando então o C_2H_5 .

Como vimos, as taxas de reações são dependentes da temperatura. Uma prática comum é a geração de mecanismo dedicados a uma faixa específica de temperatura. Mecanismos validados para faixas maiores são mais complexos. Desta forma, ao utilizar um modelo cinético, é importante saber se o mecanismo utilizado foi gerado e validado para a faixa de temperatura em estudo.

2.2.2.3 Atraso de Ignição e Coeficiente Negativo de Temperatura

Conforme a discussão trazida por Cancino, L.R., et. al., 2009, o atraso de ignição é um parâmetro importante quando tratado o assunto de knock em motores de combustão por centelha pois é importante saber após quanto tempo de residência um combustível entra em ignição em determinadas condições de temperatura e pressão. O atraso de ignição é característica de cada combustível e em alguns casos ocorre um comportamento negativo do

tempo de atraso de ignição chamado de coeficiente negativo de temperatura (*Negative temperature coefficient - NTC*). A Figura 2.8 mostra o tempo de atraso de ignição para misturas de isooctano (RON=100) e n-heptano (RON=0) desenvolvidos por Pepiot, P.

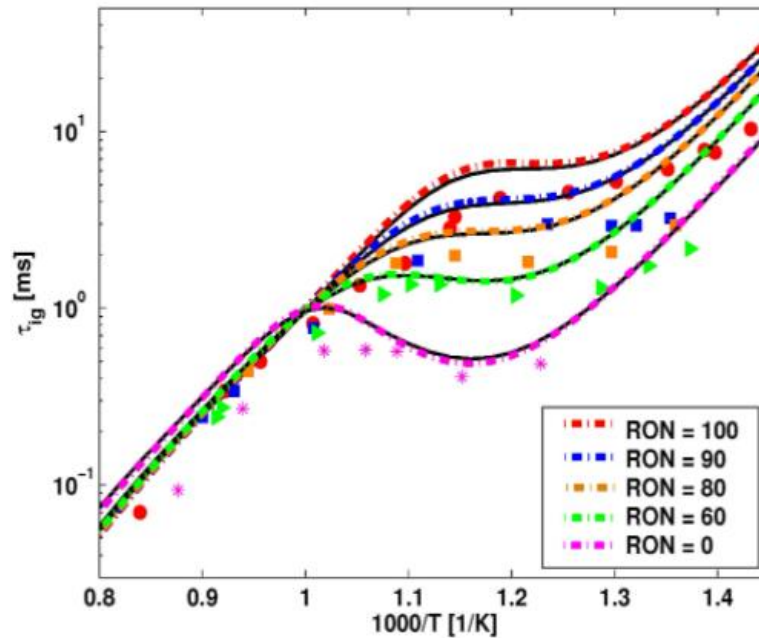


Figura 2.8 - Atraso de ignição para misturas estequiométricas de isooctano e n-heptano em diferentes números de octanos (RON) a 40 bar [Pepiot, P.]

Observa-se que, principalmente em baixas temperaturas, o tempo de atraso de ignição é menor para misturas contendo maior percentual de n-heptano e além disso, há uma maior tendência de coeficiente negativo de temperatura para combustíveis com altos teores de n-heptano. Esses fatores auxiliam na explicação que fazem o n-heptano ser mais suscetível ao knock pois o tempo para a mistura iniciar uma autoignição é reduzido.

2.3 Chemkin

O Chemkin é um software dedicado à simulação baseada em mecanismos de cinética química. Ele possui diversos modelos em sua biblioteca dentre os quais há o modelo dedicado a motores de combustão interna tanto de ignição por compressão como o de ignição por

centelha, que foi utilizado no presente trabalho. A seção seguinte apresenta o modelo utilizado bem como seu equacionamento.

2.3.1 Modelo SI de duas zonas

Este é um modelo disponível no software Chemkin para avaliação da combustão em motores de combustão interna de ignição por centelha. Trata-se de um modelo zero-dimensional capaz de avaliar a evolução dos gases dentro do cilindro no período entre o fechamento da válvula de admissão (IVC - *Intake Valve Close*) e a abertura das válvulas de exaustão (EVO - *Exhaust Valve Open*).

O modelo é constituído de duas zonas homogêneas separadas por uma frente de chama. Uma das zonas, denominada zona não queimada, inicia o ciclo preenchida pela mistura homogênea de ar e combustível. A outra, nomeada de zona queimada, inicia o processo vazia e vai acumulando os produtos da combustão ao longo do ciclo. A frente de chama é a responsável por transformar os reagentes em produtos, transferindo a massa da zona não queimada para a zona queimada. A chama se propaga assumindo combustão completa e instantânea, ela é considerada adiabática e sua espessura é fisicamente desprezada.

O primeiro período do ciclo ocorre entre o fechamento da válvula de admissão e o início da combustão dentro do qual o gás da zona não queimada é comprimido pelo pistão e a temperatura da mistura se eleva. Em seguida, inicia o período de combustão através da propagação da frente de chama que se desloca ao longo do cilindro transferindo massa entre as duas zonas conforme a Figura 2.9.

A velocidade com que a chama se desloca é dependente da taxa na qual a massa é transferida da zona não queimada para a zona queimada (\dot{m}_b). Essa taxa é derivada da taxa de variação de massa queimada com o ângulo de virabrequim ($dm_b/d\theta$), pela equação

$$\dot{m}_b = \frac{dm_b}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} \quad 2.8$$

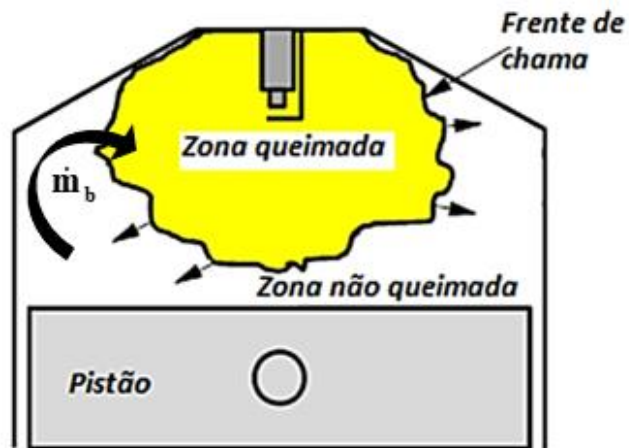


Figura 2.9 - Ilustração das duas zonas do modelo e do deslocamento da frente de chama
[Adaptado de Wang et al., 2017].

A fração de massa queimada é uma variável de entrada do modelo. A curva característica da fração de massa queimada é similar às curvas da Figura 2.10 e pode ser obtida experimentalmente. A Seção 3.1.6.8 apresenta a metodologia de derivação dessa curva a partir da pressão de cilindro medida no motor.

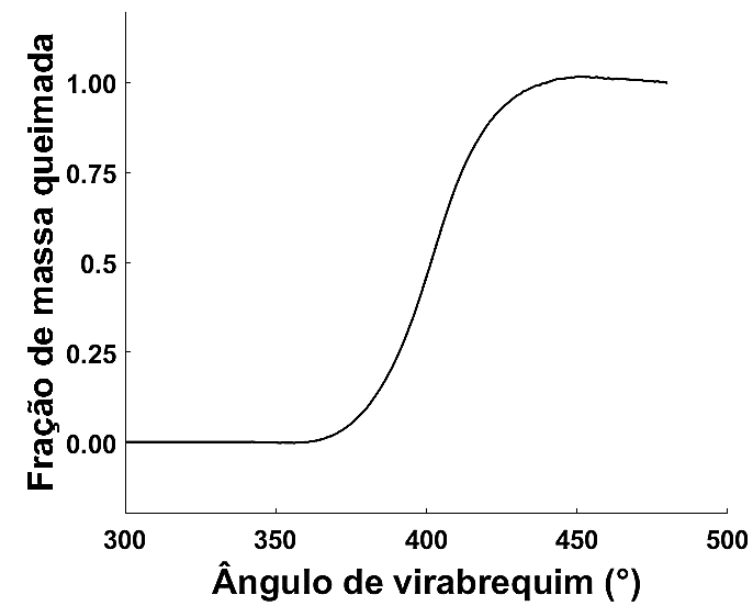


Figura 2.10 - Curva característica da fração de massa queimada.

Neste modelo computacional, as equações de conservação de massa, das espécies e da energia são resolvidas ao longo do tempo e a energia química liberada causa um aumento da pressão no interior do cilindro e conseqüente transferência de energia dos gases para o pistão. A pressão é considerada uniforme nas duas zonas.

Após o término da combustão toda a massa está contida na zona não queimada, e ocorre a expansão dos gases até o momento de abertura da válvula de exaustão que determina o fim do processo.

O modelo de motor de ignição por centelha de duas zonas do Chemkin pode ser utilizado para avaliar a tendência dos combustíveis ao knock. Neste modelo em específico, é possível ativar a utilização de um mecanismo de cinética química para prever a evolução da combustão da zona não queimada durante o processo de propagação da chama. As reações elementares nesta zona são modeladas pelo mecanismo cinético imposto, possibilitando assim a identificação da autoignição da mistura não queimada. Como essa autoignição é condição para ocorrência do knock, o modelo considera a autoignição como o próprio knock. Desta forma, torna-se possível comparar a resistência ao knock para diferentes condições e combustíveis, através do modelo computacional.

A fundamentação teórica apresentada nesta seção é importante para o entendimento do fenômeno knock e foi utilizada como embasamento para todo o desenvolvimento deste trabalho.

3 METODOLOGIA

Este trabalho foi dividido em duas partes: experimental e numérica. Na parte experimental consta a descrição do motor, as alterações nele realizadas, o setup experimental, o procedimento de realização dos testes e o processamento dos dados experimentais. A parte numérica apresenta as simulações realizadas no modelo de duas zonas do software Chemkin.

3.1 Metodologia experimental

3.1.1 Descrição do motor de teste

Os testes experimentais deste trabalho foram realizados em um motor CFR (*Cooperative Fuel Research*). A Tabela 3.1 apresenta as características deste motor.

Tabela 3.1 - Características do motor CFR utilizado nos testes.

Parâmetro	Descrição
Número de cilindros	1
Diâmetro (mm)	82,55
Curso (mm)	114,3
Volume deslocado (cm ³)	611,3
Comprimento da biela (mm)	243
Razão de Compressão	Variável de 4 a 18
Abertura da válvula de admissão	12° DPMS
Fechamento da válvula de admissão	197° DPMS
Abertura da válvula de exaustão	500° DPMS
Fechamento da válvula de exaustão	720° DPMS
Arrefecimento	Circulação de líquido forçada
Alimentação de combustível ¹	Injeção na porta de admissão
Aspiração	Natural

¹ Originalmente é realizada por carburador. Neste trabalho foi substituído por conjunto bomba-injetor;

O motor CFR está acoplado à um motor síncrono por um conjunto polia-correia. O motor síncrono está ligado à rede elétrica e mantém a sua rotação de funcionamento constante atuando ora como motor e ora como freio em relação ao CFR. Na partida, por exemplo, há consumo de energia elétrica para colocar o conjunto em movimento. Já quando há combustão no motor CFR, a energia gerada é transmitida para a rede elétrica pelo motor síncrono. Assim, o motor CFR opera sempre em rotação constante e para alterá-la é necessário a substituição da polia de acoplamento do motor síncrono.

Originalmente este é um motor padrão para determinação do número de octanos de combustíveis. Neste trabalho ele não foi utilizado para este fim e algumas modificações, descritas na seção seguinte, foram realizadas. A Figura 3.1 apresenta uma imagem do motor CFR utilizado nos testes.



Figura 3.1 - Foto do motor CFR utilizado nos testes.

Como característica principal, este motor possui um sistema mecânico ligado à uma manivela que permite a fácil alteração da razão de compressão pois não há necessidade de ajustes secundários, como o de válvulas de admissão e exaustão. Essa característica torna sua utilização adequada em testes que há necessidade de variações na razão de compressão, como é o caso deste estudo.

3.1.2 Adaptações realizadas no motor CFR

3.1.2.1 Unidade eletrônica de controle

Uma unidade de controle eletrônica (ECU - *Electronic Control Unit*) programável FuelTech FT300 foi instalada para gerenciar os periféricos do motor e assim facilitar o controle e as variações dos pontos de teste. Ela é responsável por monitorar a pressão de óleo, pressão da linha de combustível, temperatura do líquido de arrefecimento, gerenciar o acionamento do eletroventilador, o tempo de carregamento da bobina de ignição, o ponto de ignição, o acionamento da bomba de combustível e o tempo de abertura do injetor de combustível.

3.1.2.2 Coletor de admissão

O coletor de admissão original do motor CFR foi substituído devido à necessidade de instalação do injetor de combustível. O coletor utilizado nos testes é mostrado na Figura 3.2.

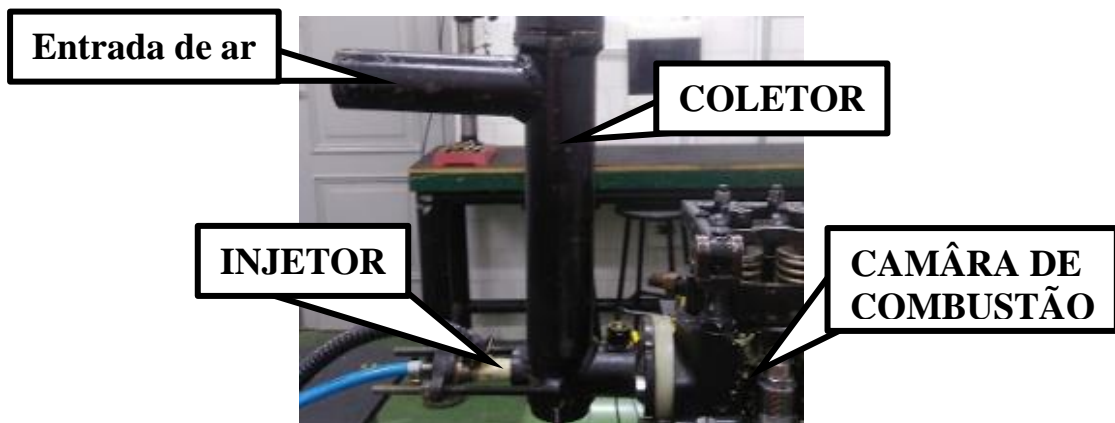


Figura 3.2 - Coletor de admissão utilizado nos testes.

3.1.2.3 Sistema de alimentação de combustível

O sistema original de alimentação de combustível é formado por 3 cubas de armazenamento ligadas a um tubo de Venturi posicionado na entrada do coletor de admissão. Através de uma chave seletora determina-se qual cuba fornecerá o combustível. O combustível selecionado é succionado no Venturi devido à queda de pressão gerada pela passagem do ar direcionado ao coletor de admissão. Neste ponto ocorre a mistura de ar e combustível que é admitida no cilindro do motor.

O sistema de alimentação original foi substituído por um injetor de combustível (*Bosch - 0309060311*) instalado no duto de admissão do motor (*PFI - Port Fuel Injection*) conforme apresentado na Figura 3.2. O combustível é pressurizado por uma bomba e a pressão de injeção é controlada por um regulador de pressão. O tempo de abertura do injetor é definido pelo operador na unidade eletrônica programável. Este novo sistema permite um controle mais fácil e preciso da quantidade de combustível necessária em cada condição de teste. Para a realização dos testes a pressão de injeção foi regulada em 3 bar.

3.1.2.4 Sistema de ignição

O sistema original de ignição do CFR é composto por uma unidade temporizadora acoplado ao eixo da árvore de cames e uma fonte de alimentação responsável pelo carregamento de um capacitor. Por contato mecânico, uma palheta conectada ao eixo de cames aciona um relé para descarregar um capacitor e resultar na centelha da vela de ignição. Neste sistema, para alteração do ponto de ignição é necessário girar a carcaça da unidade temporizadora pois assim, a posição do contato mecânico é alterada.

Neste estudo, em substituição à unidade temporizadora por contato mecânico, o gerenciamento do ponto de ignição foi realizado pela ECU. Por um período pré-determinado, um sinal é enviado pela ECU para carregar o capacitor da bobina. Quando a ECU envia um sinal a energia do capacitor é descarregada sobre os enrolamentos da bobina desencadeando o processo que resulta na geração da centelha de ignição.

Este novo sistema permite alterar o ponto de ignição do motor informando na ECU a posição do virabrequim em que se deseja a ocorrência da centelha. Dessa forma há mais

controle, precisão e facilidade na alteração do ponto de ignição. Para a realização dos testes foi utilizada uma vela de ignição da marca NGK, modelo CPR8EA-9.

3.1.2.5 Medição de velocidade de rotação

Devido à necessidade de a ECU reconhecer a posição em que se encontra o pistão do motor durante o ciclo, foi instalado no eixo do virabrequim uma roda dentada que possui espaço para 60 dentes, igualmente espaçados, porém conta com apenas 58 deles (dois dentes faltantes). Um sensor indutivo é posicionado de forma que identifique esses dentes e gere um sinal para a ECU que, ao detectar o dente faltante, relaciona esta posição com ponto morto superior do pistão. Para ocorrer essa relação corretamente, uma sincronização para ajustar a posição do dente faltante da roda dentada em relação ao ponto morto superior é necessária, conforme o manual da ECU.

3.1.2.6 Sensor de oxigênio

Um sensor de oxigênio de banda larga Bosch LSU 4.2 foi instalado no duto de exaustão do motor e conectado a um datalogger FuelTech WideBand-O2 para medição do valor de lambda dos testes em questão.

3.1.3 Instrumentos de medição

3.1.3.1 Medição de consumo de combustível

Um sistema para medição do consumo de combustível foi desenvolvido com a utilização de uma célula de carga e um condicionador de sinal *Kyowa MCC-6A*. A célula de carga, com capacidade de 1 kg, teve de ser fixada em uma base sólida para amenizar a vibração transmitida pelo piso quando o motor entrava em funcionamento. Sobre a base da célula de carga foi posicionado um recipiente contendo o combustível de teste. O combustível é succionado pela bomba de combustível e consumido conforme a demanda do motor.

Para transformar o sinal da célula de carga em um sinal apto à leitura, foi usado um condicionador que fornece para a placa de aquisição um valor em tensão proporcional a carga sofrida pela célula. Com a utilização de pesos padrões, obteve-se uma equação linear que relaciona o peso imposto sobre a célula de carga com sinal de tensão medido na placa de aquisição. O sistema para medição do consumo de combustível é apresentado na Figura 3.3 e representado pelo diagrama da Figura 3.4.

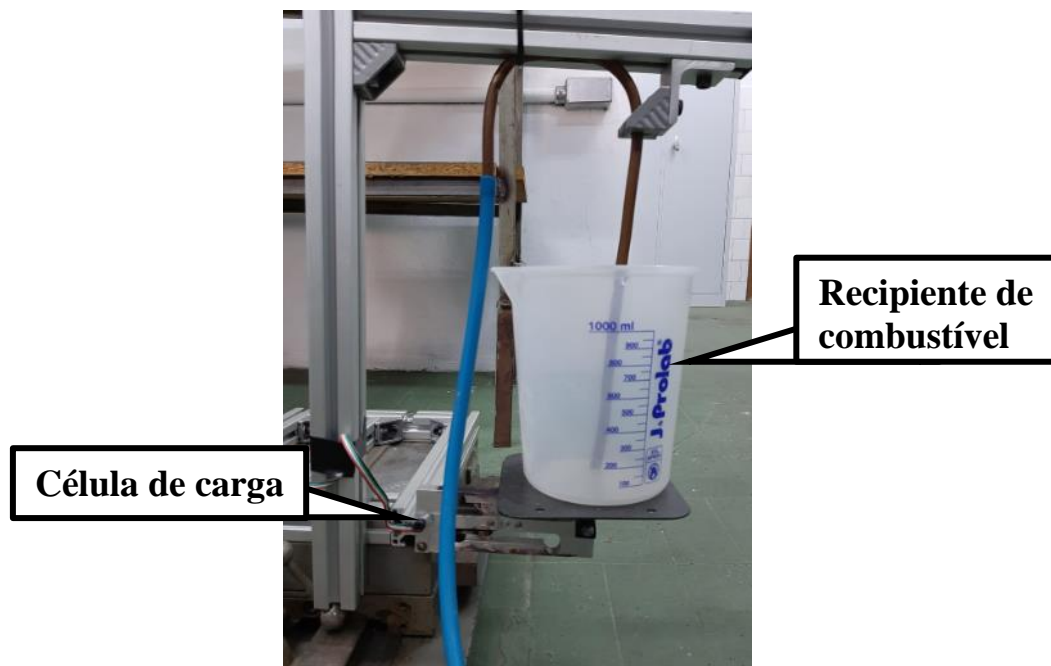


Figura 3.3 - Sistema de medição do consumo de combustível.

3.1.3.2 Sensor de pressão da câmara de combustão

Para a medição da pressão na câmara de combustão foi utilizado um sensor *Optrand D32294-Q*. Este foi instalado no sentido radial do cilindro, em lado oposto ao da vela de ignição, como pode ser observado na Figura 3.4. Este sensor pode medir até 200 bar de pressão e em uma faixa de frequência de 0,1 Hz a 20 kHz. O sinal do sensor passa por um condicionador de sinal que tem como saída um sinal de tensão proporcional à pressão aplicada sobre o sensor. Este sinal de tensão é medido em uma placa de aquisição conforme representado no esquema da Figura 3.4.

3.1.4 Aquisição de dados

3.1.4.1 Placa de aquisição

Para aquisição dos dados de teste foi usada uma placa da *National Instruments PCI 6221*. Ela recebe, em volts, os sinais do sensor de pressão e da célula de carga de medição de consumo de combustível conforme a Figura 3.4. Além disso, os sinais de um encoder, necessários para determinar o momento de início e a frequência de aquisição dos dados, também são enviados à placa. O funcionamento do encoder é descrito na seção a seguir.

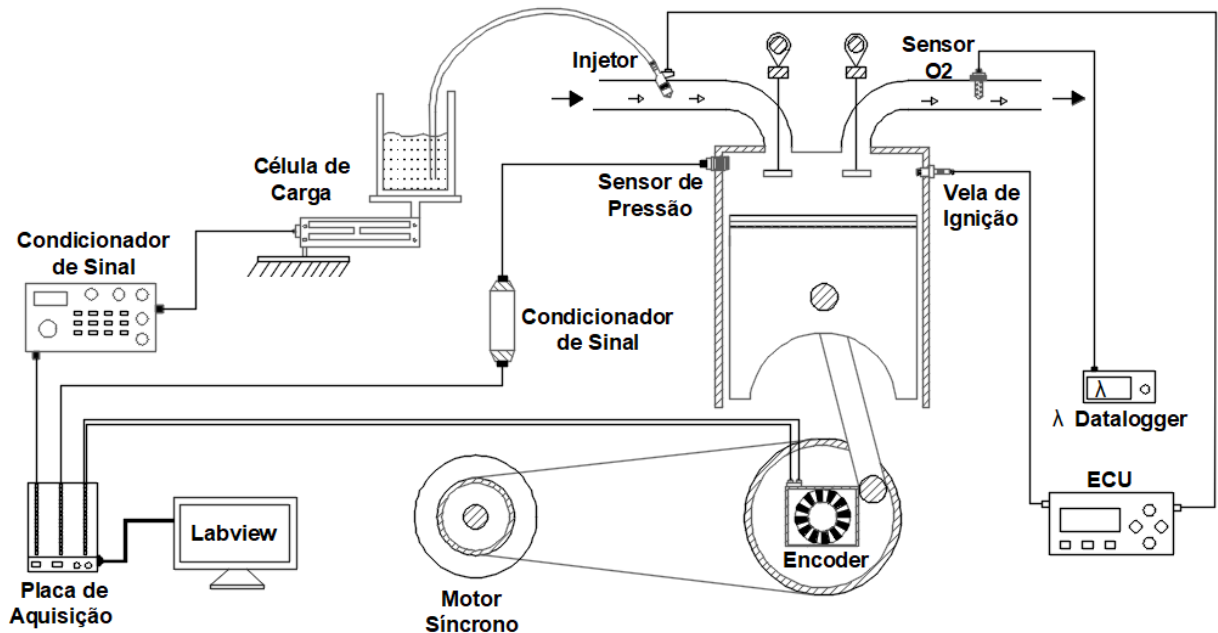


Figura 3.4 - Representação da bancada experimental utilizada nos testes.

3.1.4.2 Encoder

O encoder utilizado foi um *Baumer EIL580P*, incremental. Ele foi acoplado ao virabrequim do motor, conforme representado na Figura 3.4. O encoder exerce tanto a função de *trigger* como de relógio (*clock*) para a placa de aquisição de dados. Um dos canais do encoder envia para a placa de aquisição um pulso a cada revolução e é a partir dele que se inicia a

aquisição dos dados (*trigger*). O outro canal é o relógio (*clock*) e tem a opção de programar o número de pulsos por revolução conforme a necessidade e aplicação. Para este estudo foi selecionada a opção de 3600 pulsos por revolução o que corresponde a um pulso a cada 0,1 graus. Desta forma, a placa de aquisição irá adquirir, a partir do sinal de *trigger*, uma medição a cada 0,1 graus de virabrequim, de cada sensor.

Esta é uma resolução recomendada quando se trabalha com knock pois é suficiente para identificar o fenômeno. Resoluções menores significam mais dados sendo adquiridos o que pode representar um problema no processamento e armazenamento dos pacotes de dados. Resoluções maiores podem não ser suficientes para identificar o knock com precisão já que a onda de pressão, característica do knock, trafega dentro do cilindro na velocidade do som.

3.1.4.3 Sincronização dos dados com a posição do pistão

A posição do ponto morto superior do pistão foi detectada com o auxílio de um relógio comparador. Ele foi posicionado sobre o pistão e, após girar o virabrequim até o maior valor ser detectado no relógio (correspondente ao ponto morto superior), o número de pulsos informado pelo encoder correspondia à diferença de posição entre o trigger do encoder e o ponto morto superior. Este valor indicava o número de pontos que deveriam ser defasados para obter-se a sincronização entre os dados adquiridos e a posição real do pistão. Saber a posição do ponto morto superior é fundamental para o cálculo da curva de fração de massa queimada, para obtenção do gráfico de pressão de cilindro *versus* volume da câmara de combustão, a partir do qual a eficiência térmica de ciclo é obtida além de possibilitar analisar a posição em que o knock inicia em cada ciclo.

3.1.4.4 Interface para aquisição de dados

Uma rotina foi desenvolvida no software Labview para visualização dos dados de teste em tempo real. Essa tarefa foi necessária para possibilitar o monitoramento de ocorrência de knock em tempo real e assim possibilitar a atuação no sentido de mitigá-lo caso a intensidade aumentasse demasiadamente colocando em risco o sensor de pressão ou até mesmo o motor em teste.

A Figura 3.5 apresenta o painel do Labview utilizado para monitoramento dos testes.

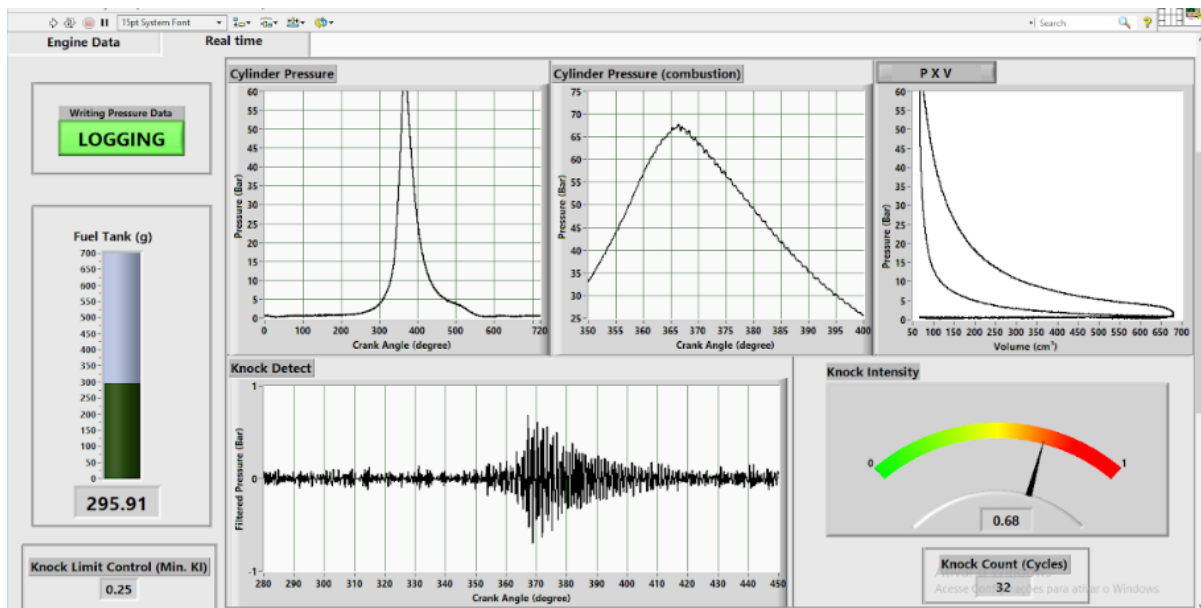


Figura 3.5 - Painel frontal do Labview utilizado para monitoramento dos testes.

Além disso, essa rotina em Labview também é responsável por salvar, em arquivos de texto, os dados de pressão e de consumo de combustível medidos em cada ponto de operação.

3.1.5 Realização dos testes

Para a realização dos testes foram usadas misturas de isoctano e heptano como combustível. As misturas utilizadas foram I100H0, I80H20, I60H40, I40H60, I20H80, I0H100, onde “I” representa o isoctano, “H” representa o n-heptano e o número posterior a cada letra significa a percentual volumétricas de cada componente na mistura.

Os testes foram realizados para diversas razões de compressão. A faixa de razões de compressão não pôde ser mantida fixa ao longo dos testes devido à ocorrência de knock distinta para cada combustível. Por exemplo, utilizando o heptano puro (I0H100) a máxima razão de compressão alcançada foi 6. Razões de compressão maiores causavam um knock muito intenso que colocava em risco o experimento. Já para o isoctano puro (I100H0) a mínima razão de compressão alcançada foi 8. Razões de compressão menores causavam uma instabilidade de

combustão muito elevada, mesmo com o ponto de ignição avançado até o máximo valor que a ECU permitia (48° APMS) causando *misfiring* em muitos ciclos e inviabilizando o ponto de teste. Por este motivo, a metodologia para definir os pontos de teste foi:

- Para cada mistura de combustível identificar a máxima e a mínima razão de compressão possível;
- Para cada razão de compressão identificar, aproximadamente, um ponto de ignição para haver ocorrência de knock;
- Varrer uma pequena faixa de pontos de ignição próximos ao ponto definido no passo anterior.
- O avanço de ignição limite para cada razão de compressão, foi definido ao decorrer dos testes através da observação do operador à um nível de knock audível mais intenso e frequente. No momento em que o ruído metálico oriundo do knock e propagado através da estrutura do motor era muito intenso, optou-se por limitar o avanço da ignição para preservação do aparato experimental, principalmente do sensor de pressão da câmara de combustão.

Com essa metodologia, somada ao pós processamento dos dados, foi possível calcular um fator de knock (apresentado na Seção 3.1.6.2) e assim definir, para cada uma das misturas de combustíveis e cada razão de compressão, o ponto de ignição onde o knock inicia.

O motor elétrico que é acoplado ao CFR foi concebido para trabalhar em uma rede elétrica de 50 Hz e através de duas opções de polia a rotação do motor CFR é reduzida para 600 rpm ou 900 rpm. Neste trabalho foi escolhida a polia para a maior rotação, porém, devido à frequência da rede elétrica disponível ser 20% maior (60 Hz), a rotação de trabalho também foi 20% maior o que resultou em um aumento da rotação do motor CFR de 900 rpm para 1080 rpm. Como não foi possível fabricar uma nova polia para ajustar a rotação, foi utilizada a rotação de 1080 rpm para todos os testes.

A Tabela 3.2 apresenta os pontos de operação testados durante os experimentos no CFR. Em todos os pontos de operação testados, a razão ar/combustível foi mantida em 1, a rotação em 1080 rpm, a pressão na linha de combustível em 3 bar e a temperatura do líquido de arrefecimento dentro da faixa de 90 ± 1 °C.

Tabela 3.2 - Pontos de operação testados (para todos os pontos: Razão ar/combustível = 1; Rotação = 1080 rpm; Pressão de combustível = 3 bar; Temperatura do líquido de arrefecimento = 90 ± 1 °C).

Combustível	Razão de Compressão	PI (°APMS)
I100H0	8	40,42,44,46,47
	10	20,22,24,25,26
	12	12,14,15,16,17
	14	6,8,10,11
	16	2,4,5,6
I80H20	6	36,38,40,42,43,44,45
	8	14,16,18,19,20
	10	0,1,2,2.5,3
I60H40	5	42,44,46,47,48
	6	22,24,26,27,28
	8	0,2,4,5,6
I40H60	4	44,46,48
	6	17,18,20,21
	7	6,7,8,9,10,11
I20H80	4	44,46,48
	5	18,24,26,28,29,30
	6	12,14,16,18,19
	7	-2,0
I0H100	4	34,36,38,39,40
	5	18,20,22,24,25,26
	6	10,12,14,15,16

Em cada ponto de operação foram adquiridos 200 ciclos consecutivos. Os dados foram salvos em arquivos de texto e utilizados no pós-processamento dos dados. A seção seguinte apresenta os cálculos realizados a partir dos dados adquiridos em teste.

3.1.6 Processamento dos dados

3.1.6.1 Método para detecção do knock

Inicialmente foram adquiridos dados de pressão no domínio de tempo para os casos de combustão com e sem knock com o intuito de identificar a frequência em que a onda de pressão, que caracteriza esse fenômeno, trafega dentro da câmara de combustão. Dois ciclos adquiridos são apresentados na Figura 3.6 *a)* e *b)* representando os ciclos sem knock e com knock respectivamente.

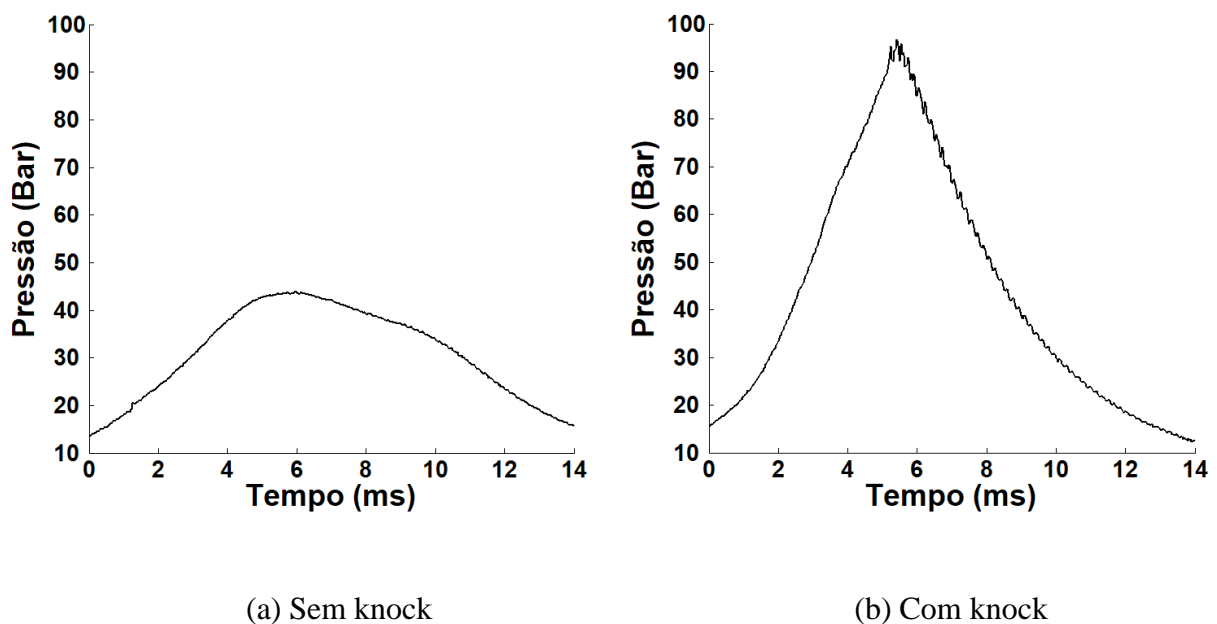


Figura 3.6 - Ciclos de pressão no domínio do tempo, *(a)* sem knock e *(b)* com knock.

A transformada de Fourier é uma técnica matemática que converte um vetor do seu domínio original para uma representação no domínio da frequência e vice-versa. A

transformada rápida de Fourier por sua vez, trata-se de um algoritmo para realizar essa conversão de maneira mais eficiente e é descrita matematicamente pela Equação 3.1.

$$Y(k) = \sum_{j=1}^n X(j)W_n^{(j-1)(k-1)} \quad 3.1$$

onde

$$W_n = e^{(-2\pi i)/n} \quad 3.2$$

é uma das n raízes da unidade.

No software Matlab esta função já está previamente programada e é acessada pelo comando *fft* (*Fast Fourier Transform*). A aplicação desta função sobre os dados de pressão da Figura 3.6 *a*) e *b*) resultaram na Figura 3.7 *a*) e *b*) que correspondem ao espectro de frequências dos ciclos sem e com knock respectivamente.

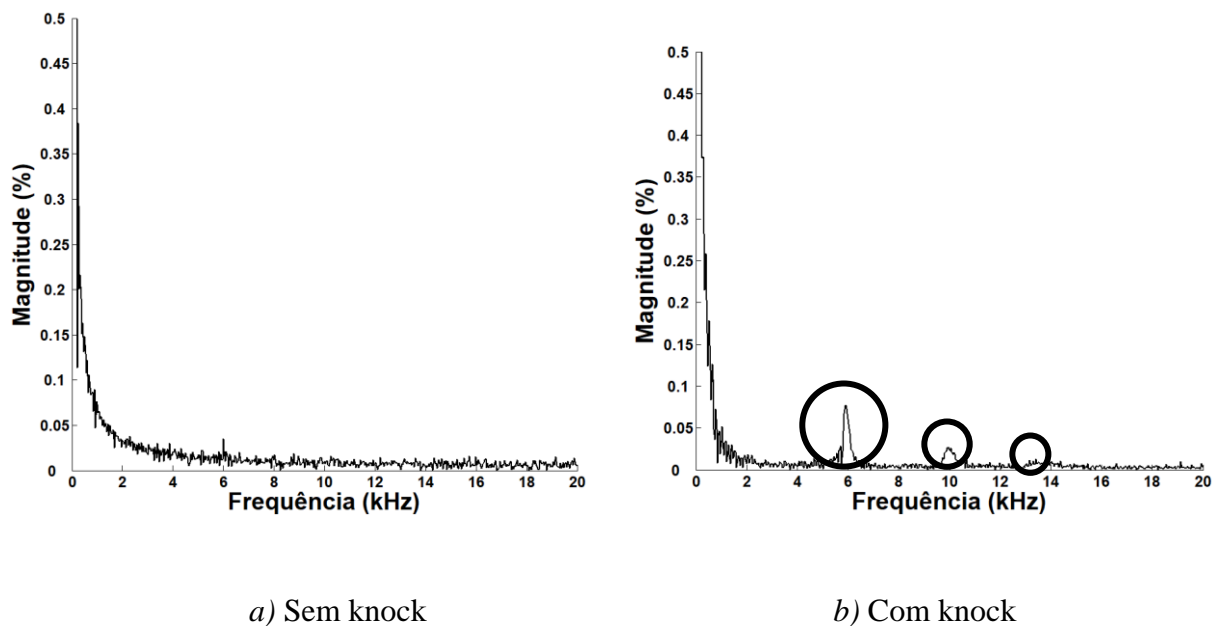


Figura 3.7 - Espectros das frequências para os casos *a*) sem knock e *b*) com knock

Observa-se que para o ciclo sem knock, Figura 3.7 *a*), predominam as baixas frequências (menores que 0,5 kHz). Estas frequências podem ser associadas à ruídos presentes

no sinal de pressão resultantes de interferências eletromagnéticas oriundas de equipamentos elétricos como o próprio motor síncrono que está acoplado ao CFR, por exemplo. Já para o ciclo em que há a ocorrência de knock, observa-se que as baixas frequências continuam presentes no sinal, porém, conforme indicado no gráfico da Figura 3.7 *b*), três novas frequências ganham destaque, uma de maior intensidade em 6 kHz e outras menos intensa em 10 kHz e 13,5 kHz. Estes valores estão dentro da mesma faixa estabelecida e utilizada por diversos autores (D'Agostino, 2014; Ren et. al., 1999; Leppard, 1986; C. Hudson et. al., 2000). Podemos concluir que, para a condição em que foi realizado esse teste específico, essas são as frequências de ressonância da câmara de combustão e estão associadas ao knock que ocorreu no ciclo em questão.

As frequências de ressonância dependem apenas da velocidade de propagação do som no meio e do formato e dimensões da câmara de combustão. Pelo fato de o knock geralmente ocorrer perto do ponto morto superior e por nenhum dos parâmetros acima citados serem alterado significativamente durante os testes, as frequências do knock são encontradas sempre próximas daquelas identificadas na Figura 3.7 *b*).

Conforme apresentado na seção a seguir, após ser conhecida a frequência de ocorrência do knock, aplicou-se um filtro de banda no sinal de pressão para extrair apenas as frequências de ocorrência de knock. Enquanto o fenômeno não ocorre, o valor retornado pelo filtro é aproximadamente zero. Quando ocorre o knock, o valor se saída do filtro é a amplitude da oscilação da pressão medida pelo sensor de cilindro. Este método foi implementado no Labview para identificar a ocorrência de knock no motor, em tempo real.

3.1.6.2 Fator de knock (FK) e Intensidade de knock (KI)

Para determinar a intensidade do knock, o sinal de pressão da câmara de combustão foi filtrado na faixa de 4 kHz a 14 kHz, pois é dentro desta faixa de frequência que ocorre o knock para o motor CFR, utilizado neste estudo (determinado conforme apresentado na Seção 3.1.6.1). Para realizar essa filtragem, foi utilizado um filtro de banda do labview. Por meio desse filtro, as frequências fora da faixa selecionada são eliminadas do sinal. Isso é importante para eliminar frequências referentes a ruídos tais como aqueles induzidos pela rede elétrica, e analisarmos, efetivamente, apenas as frequências que são associadas ao knock. Sendo assim, para a detecção

de knock, as frequências entre 4 kHz e 14 kHz permaneceram no sinal enquanto as demais foram eliminadas.

Conforme mostrado na Figura 3.8, o sinal de pressão filtrado retorna as oscilações de pressão que ocorrem dentro da faixa de frequência filtrada. O máximo valor positivo da oscilação de pressão de cada ciclo foi definido como MAPO (*Maximum Amplitude of Pressure Oscillation*) conforme definido por Tie Li et al., 2017.

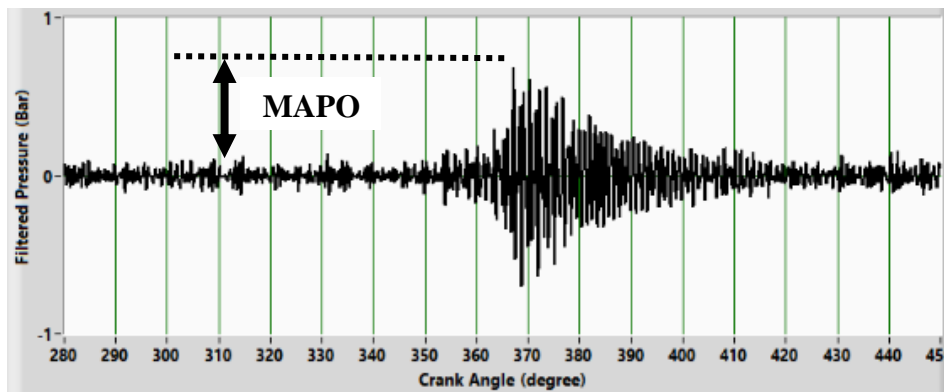


Figura 3.8 - Sinal de pressão da câmara de combustão filtrado na faixa de 4 kHz a 14 kHz.

Tradicionalmente o knock pode ser identificado conforme a sua frequência de ocorrência ao longo dos ciclos. Pode-se definir que um motor está sob condição de knock quando um determinado número de ciclos (10%, por exemplo) registram um MAPO superior a um limite estabelecido (1 bar, por exemplo). Porém, este método é incapaz de identificar com eficácia a intensidade da ocorrência dos knocks já que podemos ter 10% de ciclos muito intensos ou menos intensos. Um método que contempla também a intensidade de cada ciclo é o método estocástico de detecção de knock (*Stochastic Knock Detection (SKD)*) onde um fator de knock pode ser encontrado.

Conforme mostrado por McKenzie et al. (2016), próximo da região de início de ocorrência de knock, a distribuição do MAPO segue uma distribuição lognormal. Essa distribuição segue a função,

$$f(x) = \frac{1}{x\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\left(\frac{-(\ln(x)-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)} \quad 3.3$$

onde μ é a média logarítmica,

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \ln(x_j) \quad 3.4$$

e σ é o desvio padrão logarítmico,

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (\ln(x_j) - \mu)^2} \quad 3.5$$

A Figura 3.9 apresenta as curvas de probabilidade segundo a distribuição log-normal dos MAPOS referentes aos pontos de teste com a razão de compressão 14 e os pontos de ignição 10° APMS e 11° APMS.

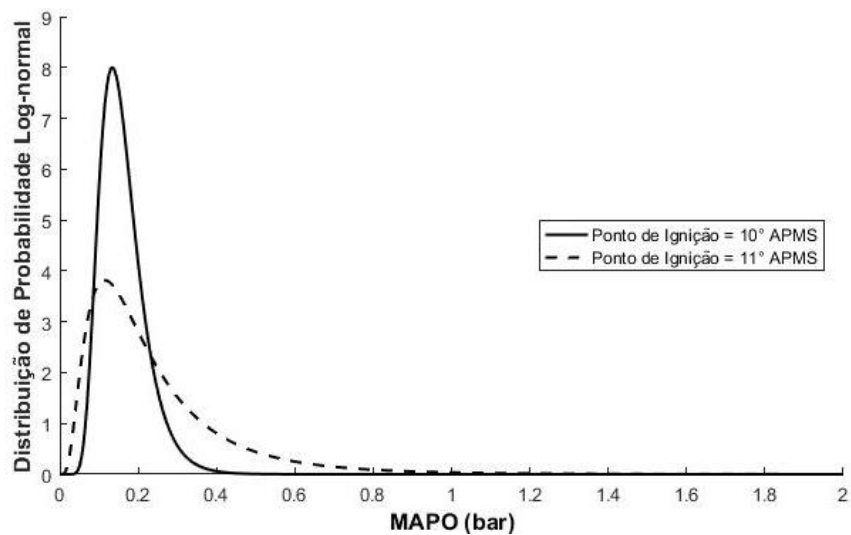


Figura 3.9 - Curvas de probabilidade segundo a distribuição log-normal dos MAPOS.

RC = 14 e PIs = 10° APMS e 11° APMS

Baseado no comportamento lognormal de distribuição dos MAPOS, e seguindo ainda a metodologia de Tie Li et al., 2017, para quantificar a intensidade das oscilações de pressão em cada ponto de teste, os valores do MAPO de cada ciclo adquirido foram plotados segundo uma função de distribuição cumulativa log-normal conforme a equação,

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_0^x \frac{1}{t} e^{\left(\frac{-(\ln(t)-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)} dt \quad 3.6$$

A Figura 3.10 apresenta as curvas de probabilidade segundo a distribuição cumulativa log-normal para a razão de compressão 14 e pontos de ignição 10° APMS e 11° APMS. A partir dessa distribuição o fator de knock (FK) pode ser calculado pela equação,

$$FK = \frac{MAPO(0,95)}{MAPO(0,25)} \quad 3.7$$

onde MAPO (0,95) e MAPO (0,25) representam, respectivamente, o valor de MAPO nos pontos de 95% e 25% da distribuição acumulada, conforme demarcados na Figura 3.10.

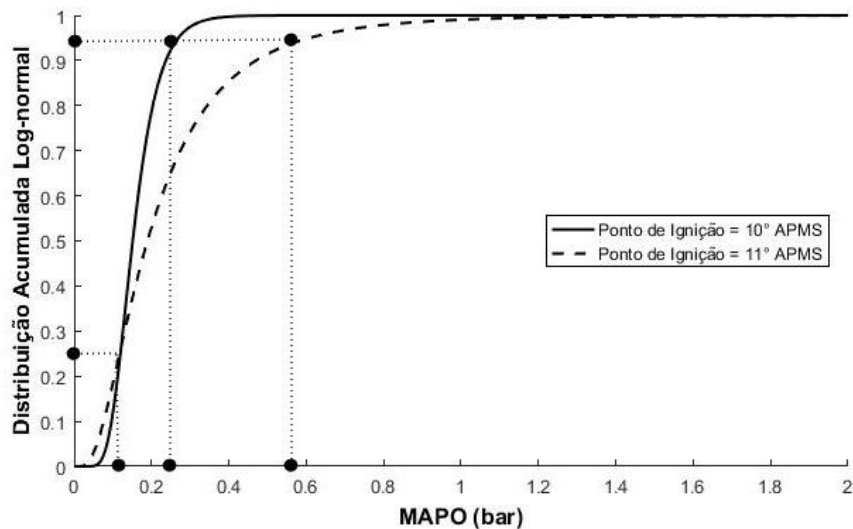


Figura 3.10 - Distribuição acumulada lognormal dos MAPOs.

RC = 14 e PIs = 10° APMS e 11° APMS

Polonowski (2008), analisou diferentes definições para o cálculo do fator de knock e conclui que a razão $MAPO(0,95)/MAPO(0,25)$ apresentou o melhor desempenho para expressar a intensidade do knock.

Observa-se da Figura 3.10 que o valor de $MAPO(0,25)$ tem pouca variação para os diferentes pontos de operação do motor. Já o valor de $MAPO(0,95)$ é maior para o ponto de ignição 11 pois neste ponto de operação os níveis de oscilações na pressão de cilindro foram maiores. Dessa forma o fator de knock (FK) aumenta para casos onde há maiores oscilações de pressão sendo assim um bom indicativo para determinar a ocorrência de knock no motor. Além disso, o cálculo de fator de knock torna-se interessante visto que através da distribuição cumulativa são quantificados não apenas o número de ciclos em que ocorre knock, mas também a intensidade de knock de cada ciclo. Na prática isso significa que um ponto de operação com vários ciclos de knock leve pode ter o mesmo FK do que o de um ponto de operação onde há poucos ciclos com knock intenso pois, no primeiro caso, a constância de ocorrência é fator preponderante no cálculo do FK e, no segundo caso, a intensidade de cada ciclo com knock prevalece no cálculo. Dessa forma este método com fundamento estatístico contempla tanto o número de knocks que ocorre em um determinado conjunto de ciclos bem como a intensidade de cada um deles.

3.1.6.3 Trabalho indicado por ciclo

O trabalho indicado de ciclo ($W_{c,i}$) de um motor de combustão é obtido pela integração cíclica da curva de pressão (p) pelo volume do cilindro (V) conforme

$$W_{c,i} = \oint p dV \quad 3.8$$

A Figura 3.11 apresenta a curva de pressão ao longo dos quatro tempos de um ciclo. A área A compreende os movimentos de compressão e expansão dos gases dentro do cilindro e é denominada de trabalho indicado bruto. A área B circunscreve os movimentos de admissão e exaustão dos gases e é denominada trabalho de bombeamento. A subtração do trabalho de bombeamento do trabalho bruto, ou seja, área A - área B , é o trabalho indicado líquido do ciclo ($W_{c,i}$).

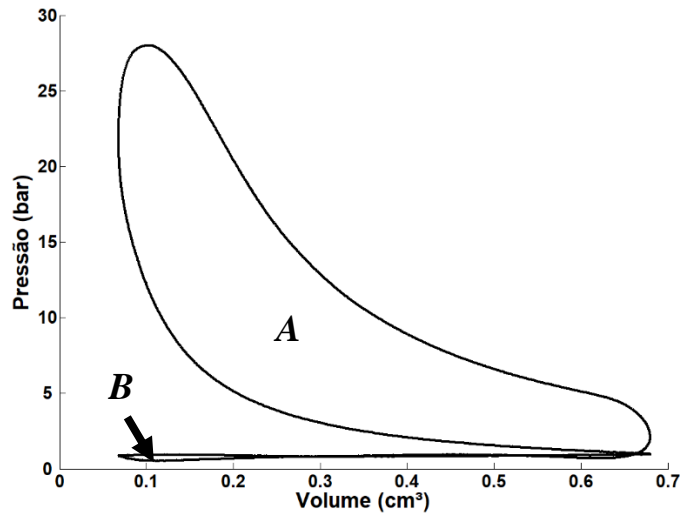


Figura 3.11 - Gráfico de pressão por volume do cilindro.

Neste estudo, o trabalho indicado líquido foi calculado através da determinação da área do gráfico de pressão por volume de cada ciclo por meio do método dos trapézios, regido por

$$W_{c,i} = \sum_{\theta=1}^{\theta=n} \left(\frac{P_{(\theta)} + P_{(\theta+1)}}{2} \right) (V_{(\theta+1)} - V_{(\theta)}) \quad 3.9$$

A variável p é a pressão do cilindro que foi medida em cada posição angular do virabrequim (θ). O número de pontos adquiridos (n), depende da resolução do encoder ($\Delta\theta$). Neste trabalho a resolução foi de 0,1 graus, logo para $\Delta\theta = 0.1$ e para os 720 graus do ciclo completo, $n = 7200$.

O volume do cilindro (V) em cada posição angular (θ) é determinado por,

$$V = \frac{\pi D^2 S}{4(RC - 1)} + \left(\frac{\pi D^2}{4} \right) \left[l + \frac{S}{2} - \left(\frac{S}{2} \cos\left(\frac{\theta \pi}{180}\right) + \sqrt{l^2 - \frac{S^2}{4} \sin^2\left(\frac{\theta \pi}{180}\right)} \right) \right] \quad 3.10$$

onde D é o diâmetro do cilindro, S é o curso do pistão, RC é a razão de compressão e l é o comprimento da biela (Tabela 3.1).

Finalmente, o trabalho indicado de ciclo em cada ponto de operação, foi definido como a média dos trabalhos indicados de todos os ciclos daquele ponto ($\overline{W}_{c,i}$)

$$\bar{W}_{c,i} = \frac{\sum W_{c,i}}{NC} \quad 3.11$$

onde NC é o número de ciclos adquiridos.

3.1.6.4 Eficiência indicada de conversão de combustível

A eficiência de conversão de combustível (η_f) representa a fração de combustível que efetivamente resultou em um incremento da pressão no cilindro. Ela considera tanto a eficiência de combustão (η_c) como a eficiência térmica (η_t). A eficiência indicada de conversão de combustível ($\eta_{f,i}$) é então definida por

$$\eta_{f,i} = \frac{W_{c,i}}{m_f LHV_{Comb}} \quad 3.12$$

onde $W_{c,i}$ é o trabalho indicado por ciclo, m_f é a massa de combustível injetada por ciclo e LHV_{Comb} é o poder calorífico inferior do combustível. O trabalho indicado por ciclo ($W_{c,i}$) é encontrado pela Equação 3.9. A massa de combustível injetada por ciclo (m_f) é obtida por

$$m_f [g / ciclo] = \frac{\dot{m}_f [g / s] 120}{S [RPM]} \quad 3.13$$

onde \dot{m}_f é o consumo de combustível em g/s , medido pela célula de carga descrita na Seção 3.1.3.1, e S é a velocidade de rotação do motor em rotações por minuto $[RPM]$. O poder calorífico inferior de cada combustível (LHV_{Comb}) depende das frações de isooctano e n-heptano presente em cada mistura e do poder calorífico inferior do isooctano puro (LHV_{Isooct}) e do n-heptano puro (LHV_{Hept}). Sendo assim, o LHV_{Comb} foi determinado por,

$$LHV_{Comb} = \frac{LHV_{Isooct} V_{Isooct} \rho_{Isooct} + LHV_{Hept} V_{Hept} \rho_{Hept}}{V_{Isooct} \rho_{Isooct} + V_{Hept} \rho_{Hept}} \quad 3.14$$

onde V_{Isooct} é a fração volumétrica de isooctano presente no combustível, V_{Hept} é a fração volumétrica de n-heptano, ρ_{Isooct} é a densidade do isooctano e ρ_{Hept} é a densidade do

n-heptano. Os resultados do cálculo do poder calorífico inferior de cada mistura dos combustíveis estão apresentados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 - Poder calorífico inferior dos combustíveis utilizados nos testes.

Combustível	% Isooctano	% n-heptano	ρ (g/cm ³)	LHV (kJ/kg)
I100H0 (Isooctano)	100	0	0.6919 ¹	44651.00 ²
I80H20	80	20	0,6903	44705.28 ³
I60H40	60	40	0,6886	44759.82 ³
I40H60	40	60	0,6870	44814.62 ³
I20H80	20	80	0,6853	44869.68 ³
I0H100 (n-heptano)	0	100	0.6837 ¹	44925.00 ²

¹ Fonte: (Mackay et al. 2006).

² Fonte: (Ragland and Bryden 2011)

³ Calculado pela Equação 3.14.

Seguindo esta metodologia, foi encontrada a eficiência de conversão de combustível indicada de cada ciclo. Por fim, calculou-se a média das eficiências dos ciclos ($\bar{\eta}_{f,i}$) para cada ponto de operação testado através de,

$$\bar{\eta}_{f,i} = \frac{\sum \eta_{f,i}}{NC} \quad 3.15$$

3.1.6.5 Pressão média efetiva indicada (IMEP)

A pressão média efetiva de um motor é determinada pela razão entre o trabalho por ciclo e o volume deslocado do motor, V_d . Os valores são bem definidos para motores de mesma classe, e permanecem constantes durante uma ampla faixa de tamanho de motores. Por exemplo, segundo Heywood, 1988, para motores de ignição por centelha, naturalmente aspirados, o máximo valor da pressão média efetiva de freio ocorre à aproximadamente 3000 RPM e fica na faixa de 8,5 bar a 10,5 bar. Desta forma, este parâmetro torna-se importante para

a comparação entre motores de diferentes tamanhos e indica a eficácia de aproveitamento do volume deslocado para produzir trabalho de um determinado motor, podendo ser comparado àqueles da mesma categoria.

Neste estudo foi calculada a pressão média efetiva indicada de cada ciclo (*imep*) para cada ponto de operação testado segundo

$$imep = \frac{W_{c,i}}{V_d} \quad 3.16$$

A pressão média efetiva indicada de cada ponto de operação (*IMEP*) foi definida como a média dos *imeps* relativos àquele ponto. Ela é dada por

$$IMEP = \frac{\sum imep}{NC} \quad 3.17$$

3.1.6.6 Coeficiente de variação da pressão média efetiva indicada (COV_{IMEP})

A variabilidade cíclica é um fenômeno inerente aos motores de combustão interna e ocorre principalmente devido às variações nos processos de combustão dentro do cilindro, conforme discutido na Seção 2.1.1.

A determinação do coeficiente de variação da pressão média efetiva indicada (COV_{IMEP}) é uma forma de quantificar essa variabilidade. Ele é dado em percentual e foi calculado para cada ponto de operação deste estudo através de,

$$COV_{IMEP} [\%] = \frac{\sigma_{IMEP}}{IMEP} \cdot 100 \quad 3.18$$

onde σ_{IMEP} é o desvio padrão do *IMEP* calculado por

$$\sigma_{IMEP} = \sqrt{\frac{1}{NC-1} \sum_{i=1}^{NC} |imep_i - IMEP|^2} \quad 3.19$$

Segundo Heywood, 1988, valores de COV_{IMEP} acima de 10% já causam efeitos negativos na dirigibilidade de veículos, portanto, são considerados altos.

3.1.6.7 Taxa de liberação de calor

A energia química liberada pela combustão em um cilindro do motor pode ser quantificada pela taxa de liberação de calor. Conforme Heywood, 1988, a taxa de liberação de calor bruta do motor é calculada por,

$$\frac{dQ_{ch}}{d\theta} = \underbrace{\frac{\gamma}{\gamma-1} p \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{\gamma-1} V \frac{dp}{d\theta}}_{Q_n} + \underbrace{V_{cr} \left[\frac{T'}{T_w} + \frac{T}{T_w(\gamma-1)} + \frac{1}{bT_w} \ln \left(\frac{(\gamma-1)}{(\gamma'-1)} \right) \right]}_{Q_{Fendas}} \frac{dp}{d\theta} + \frac{dQ_{ht}}{d\theta} \quad 3.20$$

O primeiro termo (Q_n) representa a taxa de liberação de calor líquida, ou seja, a variação da energia sensível dentro do cilindro somada à fração de energia que efetivamente foi transferida para o pistão do motor por trabalho de fronteira. O segundo termo (Q_{Fendas}) indica a energia perdida através das fendas do cilindro durante o ciclo e o terceiro termo (Q_{ht}) é a perda de energia devido à transferência de calor dos gases de combustão para as paredes do cilindro. A Figura 3.12 representa graficamente cada termo da Equação 3.20 através da integração de cada termo ao longo do período de combustão do ciclo. A curva superior da figura mostra a energia química disponível para o ciclo ($m_f Q_{LHV}$). Ela tem um leve decréscimo quando se aproxima do ponto morto superior (0°) devido à pequena fração de combustível que escoou nas fendas do cilindro. A diferença entre o valor final de $m_f Q_{LHV}$ e Q_{ch} representa a fração de energia química não utilizada para gerar trabalho, denominada ineficiência de combustão, ou seja, a porção de combustível que não teve a oxidação completa e é desperdiçada na exaustão do motor. Esse valor pode ser medido pois, a partir de uma análise de gases na exaustão, a energia referente à queima incompleta do combustível (CO e hidrocarbonetos) pode ser calculada.

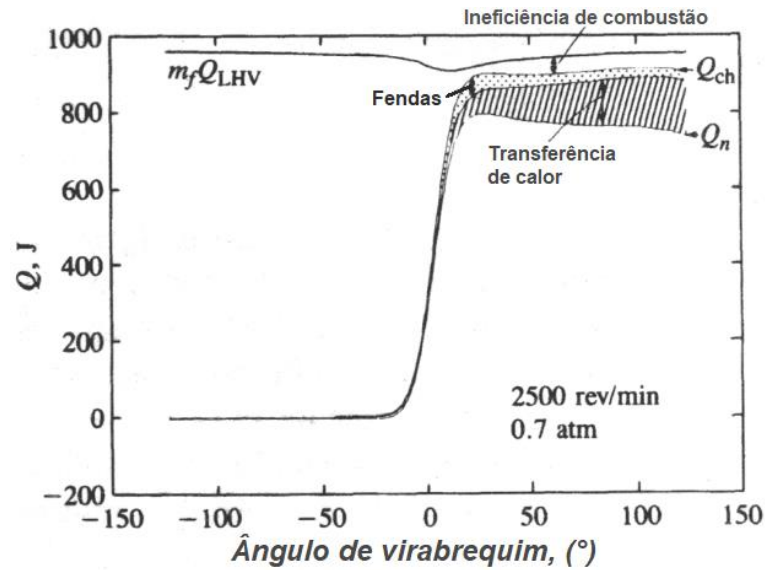


Figura 3.12 - Liberação de calor mostrando efeitos da transferência de calor, fendas e ineficiência de combustão [Adaptado de Heywood, 1988].

Um exemplo de uso da Equação 3.20 é o cálculo da taxa de liberação de calor por ângulo de virabrequim ao longo da combustão em um motor convencional de ignição por centelha através da análise da pressão na câmara de combustão. Como a pressão na câmara de combustão é o resultado físico da energia disponível para realizar trabalho sobre o pistão já considerando as perdas de combustível nas fendas e a perda por transferência de calor, segundo e terceiro termo da Equação 3.20, respectivamente, esta equação pode ser reescrita sem os dois últimos termos para representar a taxa de liberação de calor aparente como,

$$\frac{dQ_n}{d\theta} = \frac{\gamma}{\gamma-1} p \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{\gamma-1} V \frac{dp}{d\theta} \quad 3.21$$

Reescrevendo a Equação 3.21 em termos de diferenças finitas obtemos:

$$\frac{\Delta Q_n(\theta)}{\Delta\theta} = \frac{\gamma}{\gamma-1} p_{(\theta)} \frac{V_{(\theta)} - V_{(\theta-\Delta\theta)}}{\Delta\theta} + \frac{1}{\gamma-1} V_{(\theta)} \frac{P_{(\theta)} - P_{(\theta-\Delta\theta)}}{\Delta\theta} \quad 3.22$$

A Equação 3.22 foi utilizada para calcular a taxa de liberação de calor líquida para cada ponto de operação testado. A razão entre os calores específicos ($\gamma = C_p/C_v$) varia durante a

combustão devido a alteração na composição dos gases e na temperatura. Modelos de duas zonas são capazes de recalcular iterativamente este valor, porém segundo Chun, 1987, uma boa aproximação é obtida considerando $\gamma = 1,28$. Para a pressão de cilindro (p) utilizou-se o ciclo médio dos 200 ciclos adquiridos experimentalmente. O volume do cilindro (V) foi calculado de acordo com a Equação 3.10 e $\Delta\theta$ é a resolução do encoder utilizado nos testes ($0,1^\circ$).

3.1.6.8 Fração de massa queimada

A integração da taxa de liberação de calor líquida, Equação 3.22, é obtida por:

$$Q_{(\theta+\Delta\theta)} = Q_{(\theta)} + \Delta Q_{(\theta)} \quad 3.23$$

O perfil obtido é similar ao de Q_n da Figura 3.12 que representa a liberação de calor cumulativa durante a combustão. A normalização desse perfil, de forma que o máximo valor seja o unitário, é interpretado como o perfil da fração de massa queimada pelo ângulo de virabrequim. A Figura 3.13 mostra um exemplo do perfil que é obtido por esta metodologia.

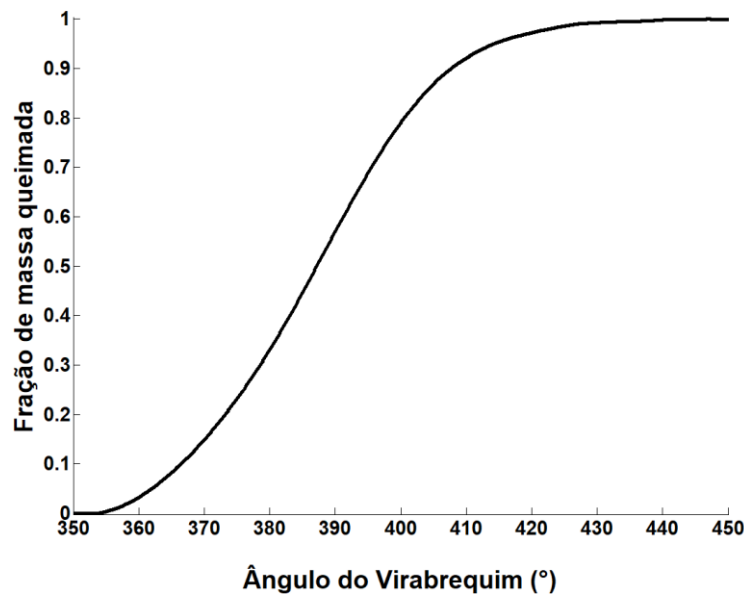


Figura 3.13 - Fração de massa queimada *versus* ângulo de virabrequim.

A partir dele é possível identificar em qual ângulo do virabrequim ocorre cada fração de combustível consumida. Essa informação é importante em simulações computacionais que utilizam alguns desses pontos como parâmetro de entrada. Os pontos mais usuais são os de 10%, 50% e 90% de massa queimada.

3.1.6.9 Duração da combustão e CA50

Segundo Heywood, 1988, a combustão em motor de ignição por centelha pode ser caracterizada por duas fases principais. A primeira é o desenvolvimento da chama que é definido como o período entre as frações de 0 a 10% de massa queimada. Algumas vezes esse período é chamado de delay de ignição. Essa última terminologia não é muito adequada pois a combustão inicia a partir do momento da centelha, ou seja, em 0% de massa queimada sendo que não há um delay de ignição real.

A segunda fase é chamada de período de queima rápida e é definido como o período entre 10% e 90% de massa queimada. Esse trecho é frequentemente utilizado para comparar a duração de combustão para diferentes pontos de operação de um motor. Os pontos de 10% e 90% foram estabelecido arbitrariamente para evitar os erros devido a dificuldade de definição com precisão do formato da curva de fração de massa queimada no início e no final da combustão e desta forma reduzir os erros ao comparar a combustão entre pontos de operação ou até mesmo entre motores distintos.

O ponto de 50% de massa queimada (CA50) também é importante na análise de combustão de motores. Ele é um indicativo rápido do *phasing* da combustão que mostrará se a combustão está iniciando cedo ou tarde demais. Segundo Heywood, 1988, valores de 50% de massa queimada ancorados em torno de 10° depois do ponto morto superior indicam um *phasing* de combustão ajustado e em geral ocorrem no ponto de ignição para o maior torque. Para cada ponto de operação, o menor avanço de ignição que resulta no maior torque de eixo é definido como MBT (*Maximum Brake Torque*). Esse é o ponto de ignição para a maior eficiência em cada ponto de operação e, portanto, trata-se do ponto de ignição ótimo. No entanto, em diversas regiões de operação do motor esse ponto de ignição não pode ser utilizado pois a ocorrência de knock antecede o MBT, ou seja, ainda há tendência de aumento de torque

com o avanço do ponto de ignição, porém o knock impossibilita esse avanço. Neste caso, diz-se que o ponto de operação foi limitado por ocorrência de knock.

3.2 Metodologia numérica

No presente trabalho utilizou-se o software Chemkim para realização de simulações computacionais utilizando as misturas de isooctano e n-heptano como combustível para realização de uma avaliação da evolução das espécies químicas ao longo da combustão. O modelo de duas zonas para aplicação em motores de ignição por centelha apresentado na Seção 2.3.1 foi utilizado como ferramenta de simulação. Os dados do motor CFR apresentados na Tabela 3.1 foram inseridos no modelo. Utilizou-se o mecanismo de cinética química desenvolvido pelo Lawrence Livermore National Laboratory para aplicação e simulações de misturas de isooctano e n-heptano¹. Esse mecanismo é o responsável por reger as reações químicas do modelo numérico na zona não queimada, onde temos o interesse de detectar uma possível autoignição e relacioná-la com os resultados experimentais dos testes.

Como já discutido na Seção 2.3.1 este modelo requer a imposição de uma curva de fração de massa queimada para definir a velocidade da propagação de chama do modelo. Para avaliar a influência de cada combustível na ocorrência de knock, sem considerar variações de razão de compressão e ponto de ignição, foi realizada inicialmente uma simulação para cada mistura de combustível utilizada nos testes experimentais (I100H0, I80H20, I60H40, I40H60, I20H80, I0H100) e imposta a mesma razão de compressão, ponto de ignição e curva de fração de massa queimada. Desta forma, a velocidade de consumo de combustível pela frente de chama é a mesma em todos os casos e então apenas os efeitos do isooctano e do n-heptano sobre a autoignição da zona não queimada podem ser avaliados.

Em seguida, foi escolhido um ponto de teste experimental do qual havia sido possível detectar knock audível, ou seja, com uma intensidade de knock mais elevada. Realizou-se a média da pressão dos 200 ciclos medidos e a partir dela obteve-se a curva de massa queimada segundo a metodologia apresentada na Seção 3.1.6.8. Essa curva foi imposta como dado de entrada para rodar o modelo computacional.

¹ Disponível em: <https://combustion.llnl.gov/archived-mechanisms/surrogates/prf-isooctane-n-heptane-mixture>, acessado em 24/05/2020.

Observou-se dos resultados que, mesmo sendo um ponto de teste com fator de knock elevado, a simulação não detectou autoignição. Isso ocorreu por ter sido utilizada a média dos 200 ciclos para o cálculo da curva de MFB pois, mesmo em um ponto de operação com knock intenso, a grande maioria dos ciclos não apresenta knock. Desta maneira, ao calcular-se a média dos 200 ciclos, o knock é suprimido e o traço de pressão passa a ser de uma combustão normal.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Resultados experimentais

Os testes experimentais foram realizados para seis misturas de isooctano e n-heptano conforme os pontos listados na Tabela 3.2. Seguindo a metodologia apresentada na Seção 3.1.5, para cada razão de compressão foi varrida uma pequena faixa de pontos de ignição próximos a região de início de ocorrência do knock. Durante a realização dos testes, a identificação do knock audível foi o parâmetro utilizado para cessar o avanço da ignição. Observou-se ao decorrer dos experimentos que, em algumas razões de compressão e misturas de combustíveis específicas, o ponto de ignição para o início da ocorrência do knock era muito evidente. Em outras condições, não foi possível identificar claramente a severidade do knock apenas pela audição, pois o ruído característico desse fenômeno se confundia com os ruídos inerentes ao funcionamento do motor. Isso se deve ao fato de que, em alguns casos, as máximas oscilações de pressão (MAPOs) eram muito altas, gerando um ruído metálico muito claro e audível e, em outros casos, essas oscilações eram menores, dificultando a identificação do knock audível.

A Figura 4.1 apresenta a distribuição dos MAPOs ao longo dos 200 ciclos adquiridos para o combustível isooctano puro (I100H0) na razão de compressão 16 e nos pontos de ignição 2°, 4°, 5° e 6° APMS. Já a Figura 4.2 apresenta a distribuição dos MAPOs ao longo dos 200 ciclos para a mistura contendo 80% de isooctano (I80H20) na razão de compressão 8 e pontos de ignição 16°, 18°, 19° e 20° APMS. Observa-se no primeiro caso (Figura 4.1) que para os pontos de ignição 2°, 4° e 5° APMS o MAPO é próximo de zero para quase todos os ciclos, ou seja, há poucos ciclos com oscilação na pressão da câmara de combustão. Ao ocorrer o avanço do ponto de ignição para 6° APMS, passam a ocorrer elevadas oscilações de pressão em diversos ciclos. Em alguns deles a amplitude da oscilação ultrapassa o valor de 10 bar. Esse é um ponto onde a ocorrência do knock audível é claramente perceptível e, conseqüentemente, foi o ponto de ignição limite para essa razão de compressão.

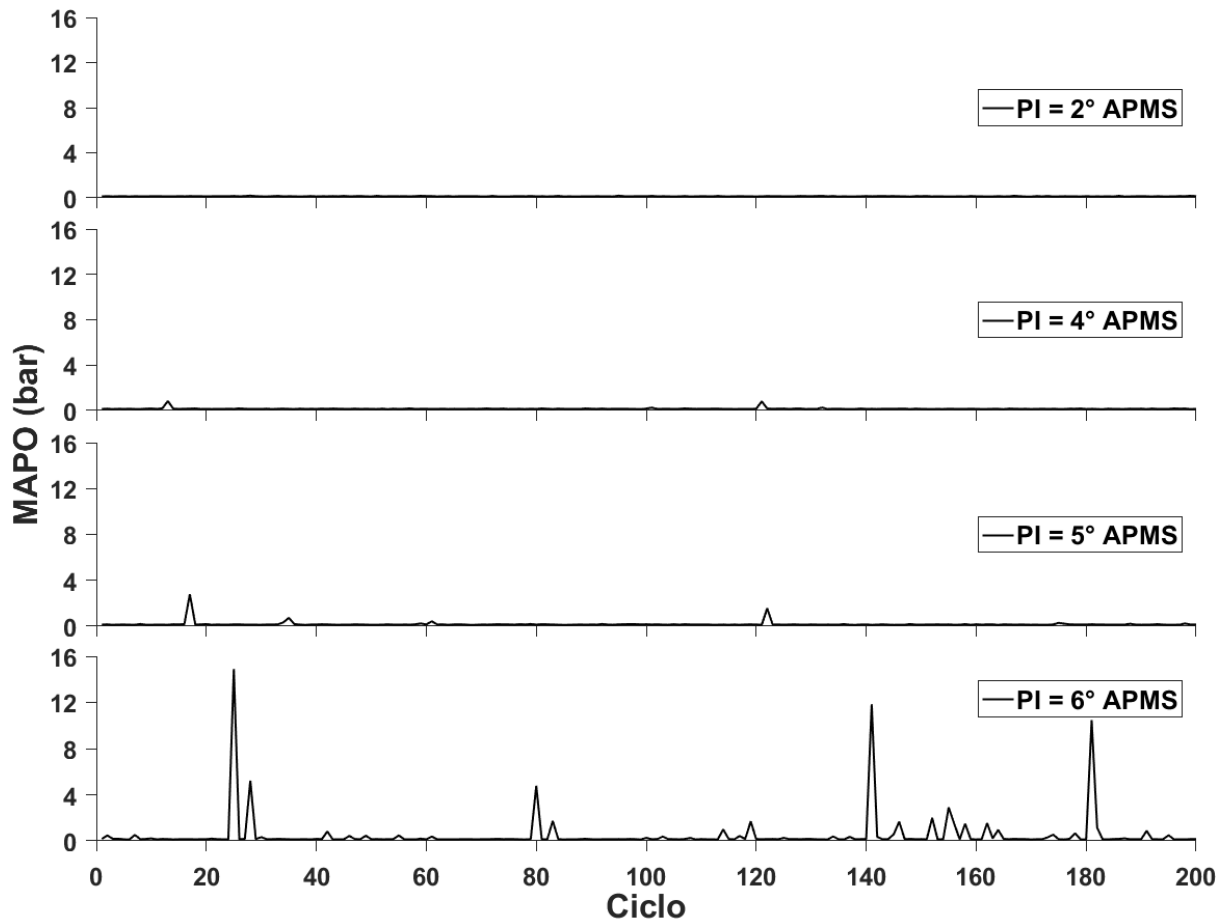


Figura 4.1 - Distribuição dos MAPOs ao longo dos 200 ciclos adquiridos. Combustível I100H0; RC = 16; PIs = 2°, 4°, 5° e 6° APMS.

Já na Figura 4.2, observa-se que para o ponto de ignição 16° APMS, praticamente todos os ciclos apresentam oscilação na pressão da câmara de combustão próximo de zero. Já para os pontos de ignição 18° e 19° APMS há ocorrência de oscilação de pressão em diversos ciclos, porém com intensidades baixas. Nesses dois pontos, a ocorrência do knock audível não é clara pois o ruído produzido por essas baixas oscilações de pressão, pode ser confundido com os ruídos naturais de funcionamento do motor. Observa-se ainda que, ao avançar o ponto de ignição para 20° APMS, a ocorrência de knock passa ser mais frequente. Embora as intensidades ainda sejam menores se comparadas ao ponto de 6° APMS da Figura 4.1, neste caso o knock audível pôde ser identificado devido a alta frequência com que ocorre e por isso também foi o ponto de ignição limite nesta condição de operação.

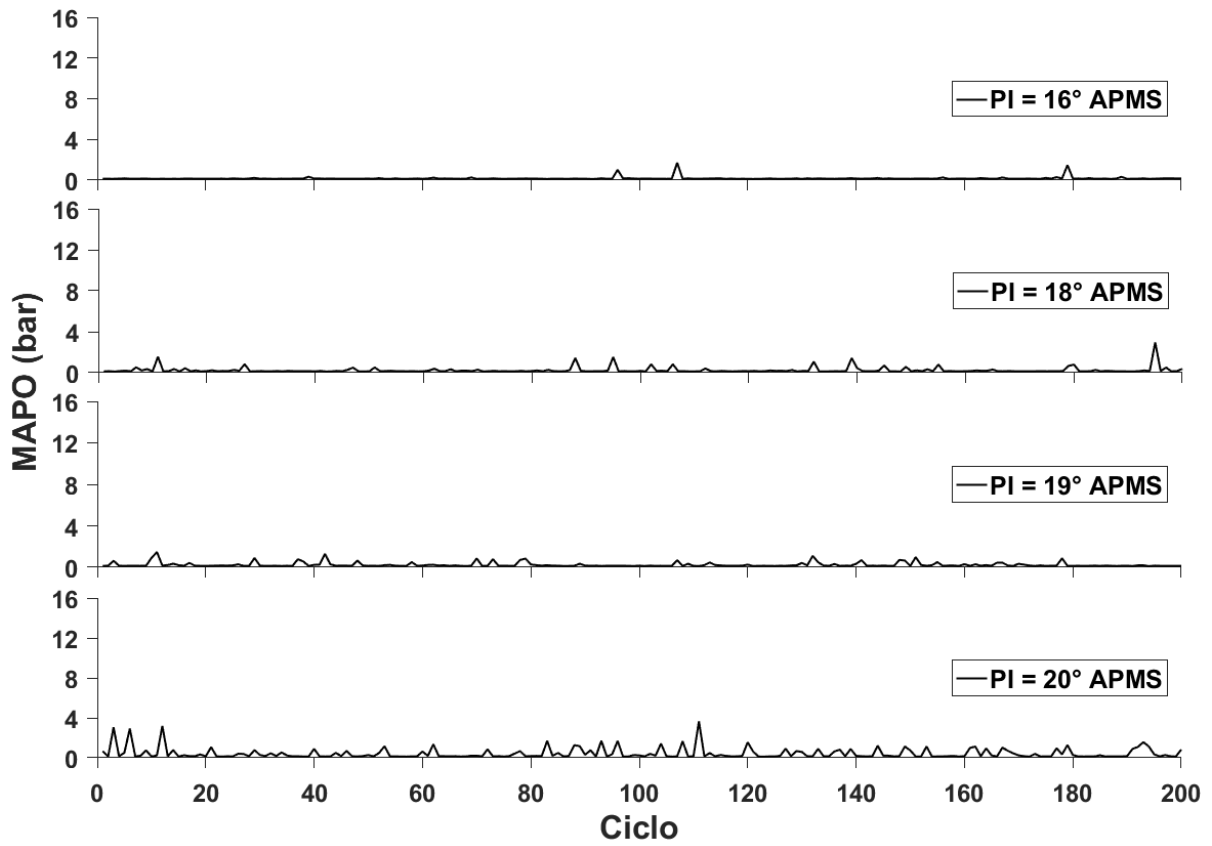


Figura 4.2 - Distribuição dos MAPOs ao longo dos 200 ciclos adquiridos. Combustível I80H20; RC = 8; PIs = 16°, 18°, 19° e 20° APMS.

Adicionalmente, escolheu-se arbitrariamente o valor de MAPO de 0,5 bar como referência para quantificar o número de ciclos que ultrapassaram este limite em cada ponto de operação. Conforme os resultados apresentados na Figura 4.3, observa-se para o combustível I100H0, na razão de compressão 16 e ponto de ignição 6° APMS, 11% dos ciclos ultrapassaram o limite estipulado de 0,5 bar. Já para o combustível I80H20, na razão de compressão 8 e ponto de ignição 20° APMS, 25% dos ciclos ultrapassaram o limite de 0,5 bar.

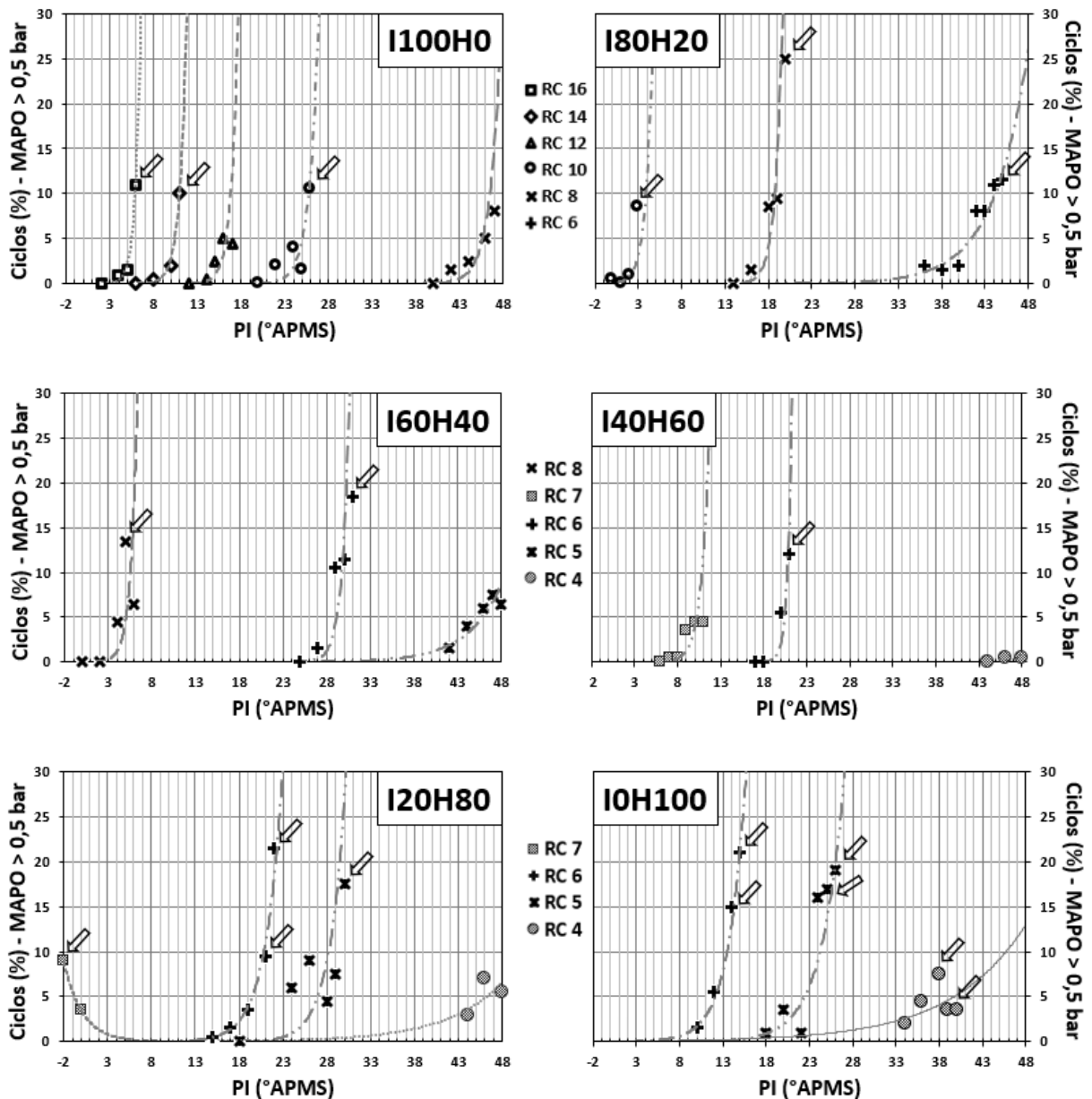


Figura 4.3 - Percentual de ciclos que apresentaram MAPO > 0,5 bar em cada ponto testado.

Além disso, observou-se durante a realização dos testes que alguns pontos de operação que apresentaram menos ciclos ultrapassando o limite de 0,5 bar, apresentaram um knock mais claramente audível, se comparados com pontos em que houve alto percentual de ultrapassagem deste limite (como já exemplificado na Figura 4.1 e Figura 4.2). Os pontos identificados pelas flechas são pontos de knock audível claramente identificado durante os testes

Pelos dados apresentados até aqui, fica evidenciado que a simples contagem do número de ciclos em que ocorrem amplitudes na oscilação de pressão acima de um valor pré determinado, é um método que pode deixar de identificar algumas condições de ocorrência de knock pois, embora ocorra o knock em poucos ciclos, esses possuem oscilações de pressão elevadas e podem danificar severamente o motor (como o ponto de 6° APMS da Figura 4.1, por exemplo). Conforme já mencionado por Li et al., 2017, no processo de calibração de um motor, quando utilizada a metodologia de contagem do número de ciclos, são necessárias escolhas da intensidade de oscilação de pressão limite para a detecção de knock em diversas condições de operação. Isso pode ser observado também na Figura 4.3 pois, para um mesmo limite atribuído houve alta variação no percentual de ciclos com oscilação na pressão. Seria mais prudente escolher diferentes limites em cada região de operação. A escolha desses limites não é trivial e depende das especificações de projeto já que as intensidades de knock irão afetar a vida útil do motor bem como os resultados de performance e emissões. Esse trabalho costuma ser complexo e demandar bastante tempo pois exige que sejam feitos testes e calibração do sensor de knock em diversas condições.

O cálculo do fator de knock apresentado na Seção 3.1.6.2, é uma alternativa para evitar esses problemas, uma vez que ele avalia a distribuição das amplitudes das oscilações de pressão de todos os ciclos e considera tanto a intensidade quando a frequência de ocorrência. O fator de knock (FK) foi calculado conforme a metodologia da Seção 3.1.6.2 e os resultados para cada mistura de combustível são apresentados na Figura 4.4 em função do ponto de ignição (PI) e da razão de compressão (RC). Os pontos identificados pelas flechas são pontos de knock audível claramente identificado durante os testes.

Se compararmos os pontos de teste do combustível I100H0, na razão de compressão 16 e ponto de ignição 6° APMS (Figura 4.1) com o do combustível I80H20, na razão de compressão 8 e ponto de ignição 20° APMS (Figura 4.2), veremos que os fatores de knock são 7,54 e 7,48 respectivamente, ou seja, são fatores de knock parecidos para comportamentos dos ciclos distintos já que no primeiro caso tivemos elevadas oscilações de pressão em poucos ciclos, e no segundo caso, foram baixas oscilações de pressão para um elevado número de ciclos. Isso evidencia que o método de cálculo do fator de knock considera ambos: amplitude e frequência de ocorrência das oscilações de pressão ao longo dos ciclos.

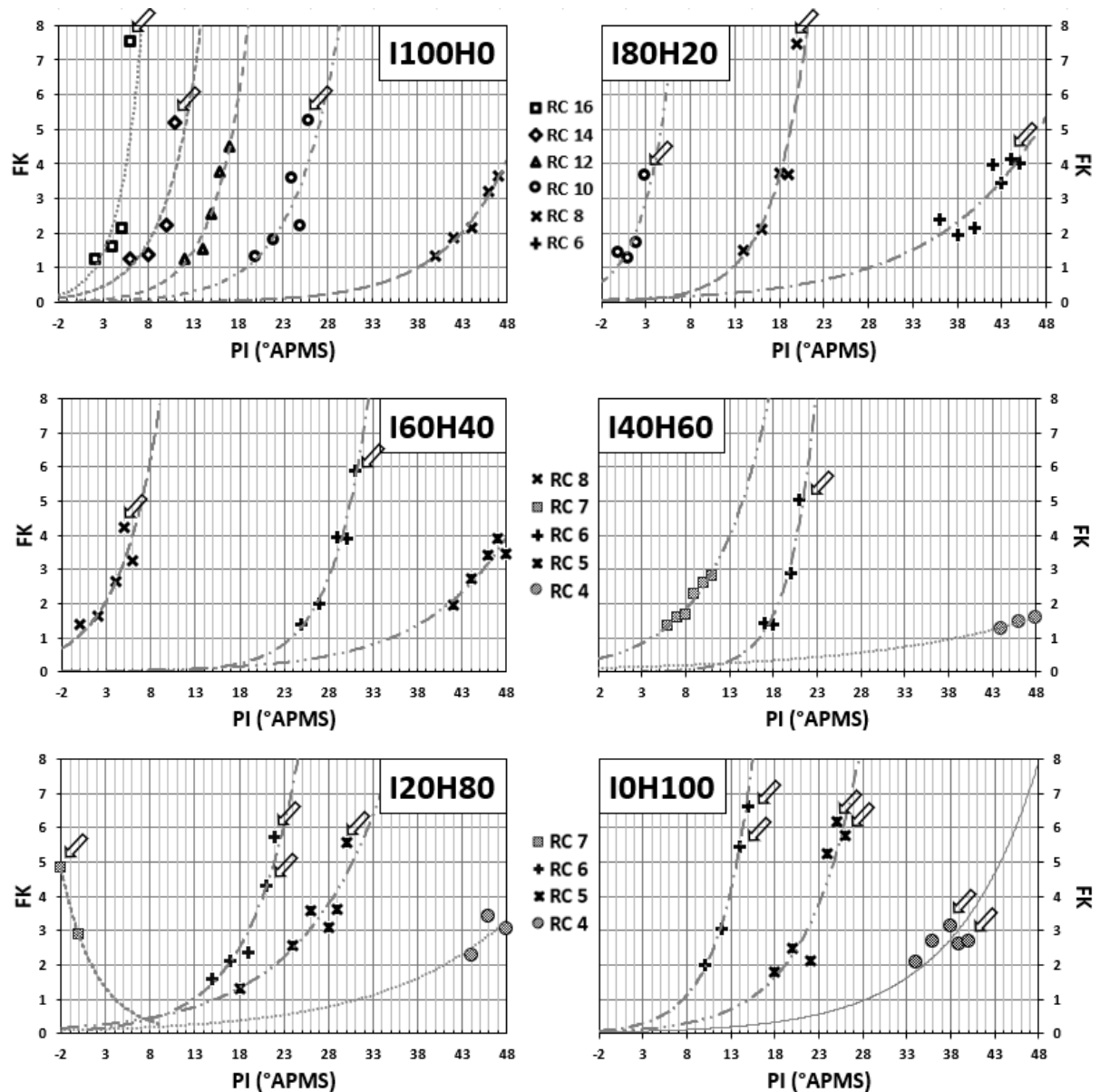


Figura 4.4 - Fator de knock (FK) pelo ponto de ignição (PI) para cada razão de compressão e cada combustível testado.

Da Figura 4.4, observa-se um aumento do fator de knock conforme a avanço do ponto de ignição em cada razão de compressão. Isso ocorre pois, quanto maior for o avanço de ignição, mais cedo a temperatura de autoignição é atingida e uma fração maior de mistura não queimada oxida instantaneamente, causando uma maior elevação local de pressão e, conseqüentemente, maior intensidade de knock.

Em apenas alguns casos o avanço do ponto de ignição levou a uma redução do fator de knock indo em sentido oposto a tendência apresentada. Como exemplo cita-se os pontos do combustível I100H0 na razão de compressão 10 do ponto de ignição 24° APMS para 25° APMS e para o combustível I20H80 na razão de compressão 7 do ponto de ignição de -2° APMS para 0° APMS. Essa anômala redução do fator de knock pode ser associada à própria característica estocástica do knock associada a variabilidade cíclica inerente ao motor, conforme apresentado na Seção 2.1.1. As variações de homogeneização da mistura de ar e combustível principalmente próximo a região de início da combustão, quantidade de ar admitida no cilindro, fração de gás residual e temperatura da carga de gás dentro do cilindro, levam às variações na intensidade de knock. Outro fator importante que pode ajudar a explicar esse comportamento pontual oposto à tendência geral de intensidade do knock com o avanço do ponto de ignição é a temperatura de arrefecimento da câmara de combustão. Observou-se durante o procedimento experimental que, mesmo a temperatura de arrefecimento sendo mandada dentro da faixa de 89°C a 91°C, essa diferença de até 2°C era suficiente para afetar a ocorrência de knock, principalmente próximo à região de início de sua ocorrência. Observou-se que, em um mesmo ponto de operação, havia maior intensidade e propensão à ocorrência do knock quando a temperatura estava mais próxima do limite superior. Isso indica haver um limiar muito pequeno entre ocorrer ou não o knock em determinadas condições.

A influência do n-heptano na ocorrência do knock também fica evidenciada pois, quanto maior a sua fração no combustível, menores foram as razões de compressão alcançadas. Por exemplo para o I100H0 chegou-se à razão de compressão 16 e quando acrescentados 20% de n-heptano ao isooctano (I80H20), a máxima razão de compressão alcançada foi 10. Para o n-heptano puro (I0H100) testou-se até a razão de compressão 6 pois para uma RC = 7 já ocorria knock intenso mesmo com o ponto de ignição sobre o ponto morto superior. Além disso, quando comparada a mesma razão de compressão, observa-se que o avanço do ponto de ignição limite para o knock é menor para combustíveis com maior percentual de n-heptano. Como exemplo, vemos que na razão de compressão 10, o ponto de ignição limite para o knock é 26° APMS para o I100H0 e apenas 3° APMS para o I80H20. Esse resultado evidencia a maior tendência do n-heptano à autoignição.

Outro efeito perceptível pela Figura 4.4, é a rápida entrada na região de knock para misturas com pouco ou sem n-heptano na mistura. Para o isooctano puro (I100H0) e razão de

compressão 16, o fator de knock está na faixa de 1 a 2 para os pontos de ignição 2° APMS, 4° APMS e 5° APMS. Avançando o ponto de ignição para 6° APMS o FK aumenta bruscamente para 7,5. Para a razão de compressão 14, similarmente, o fator de knock está na faixa de 1 a 2 para os pontos de ignição 6° APMS, 8° APMS e 10° APMS e aumenta bruscamente para 5,2 quando o ponto de ignição é avançado para 11° APMS. Isso pode ser explicado pelo menor coeficiente negativo de temperatura (NTC) que o isooctano possui em relação ao n-heptano conforme apresentado na Seção 2.2.2.3. Como para misturas com alto teor de isooctano há pouca tendência de aumento no atraso de ignição com o aumento da temperatura (Figura 2.8), ao atingir-se as condições para autoignição da mistura ela acontecerá com pouca possibilidade de ocorrer uma tendência contrária à ocorrência da autoignição.

Para compreender melhor as condições em que os testes foram realizados e para utilizar como suporte no entendimento dos resultados acerca da ocorrência de knock, alguns parâmetros de performance dos pontos testados foram calculados.

A pressão média efetiva indicada (IMEP) foi calculada para cada ponto de operação conforme a Seção 3.1.6.5. Foram plotados mapas de IMEP em função da razão de compressão (RC) e do ponto de ignição (PI) para cada combustível, conforme apresentado na Figura 4.5. Maiores cargas foram alcançadas para combustíveis com maiores percentuais de isooctano e em razões de compressão menores. Para o isooctano puro (I100H0) nas razões de compressão 8 e 10, foram obtidos IMEPs acima de 9 bar, pois nestas condições foi possível trabalhar em pontos mais próximos do MBT (*Maximum Brake Torque*), ou seja, o menor avanço de ignição para o máximo torque. Para as razões de compressão mais altas, o IMEP ficou na faixa entre 7 bar e 8,8 bar, pois a ocorrência de knock antecipada limitava o avanço do ponto de ignição, impedindo uma aproximação do MBT e, conseqüentemente, reduzindo os valores de IMEPs obtidos.

Já para o n-heptano puro (I0H100) os máximos IMEPs ocorreram para a razão de compressão 6 e não passaram de 7,5 bar, valores abaixo dos obtidos para o isooctano puro. Para maiores percentuais de n-heptano na mistura, há ocorrência de knock mais facilmente impedindo um aumento na razão de compressão. Como em razões de compressão mais baixas a eficiência de ciclo é menor, ou seja, menor parte da energia é convertida em trabalho, os valores de IMEPs obtidos também são menores. Pelo mesmo motivo, para o n-heptano puro e razões de compressão 4 e 5, os IMEPs foram ainda mais baixos, ficando entre 5,5 bar e 7 bar.

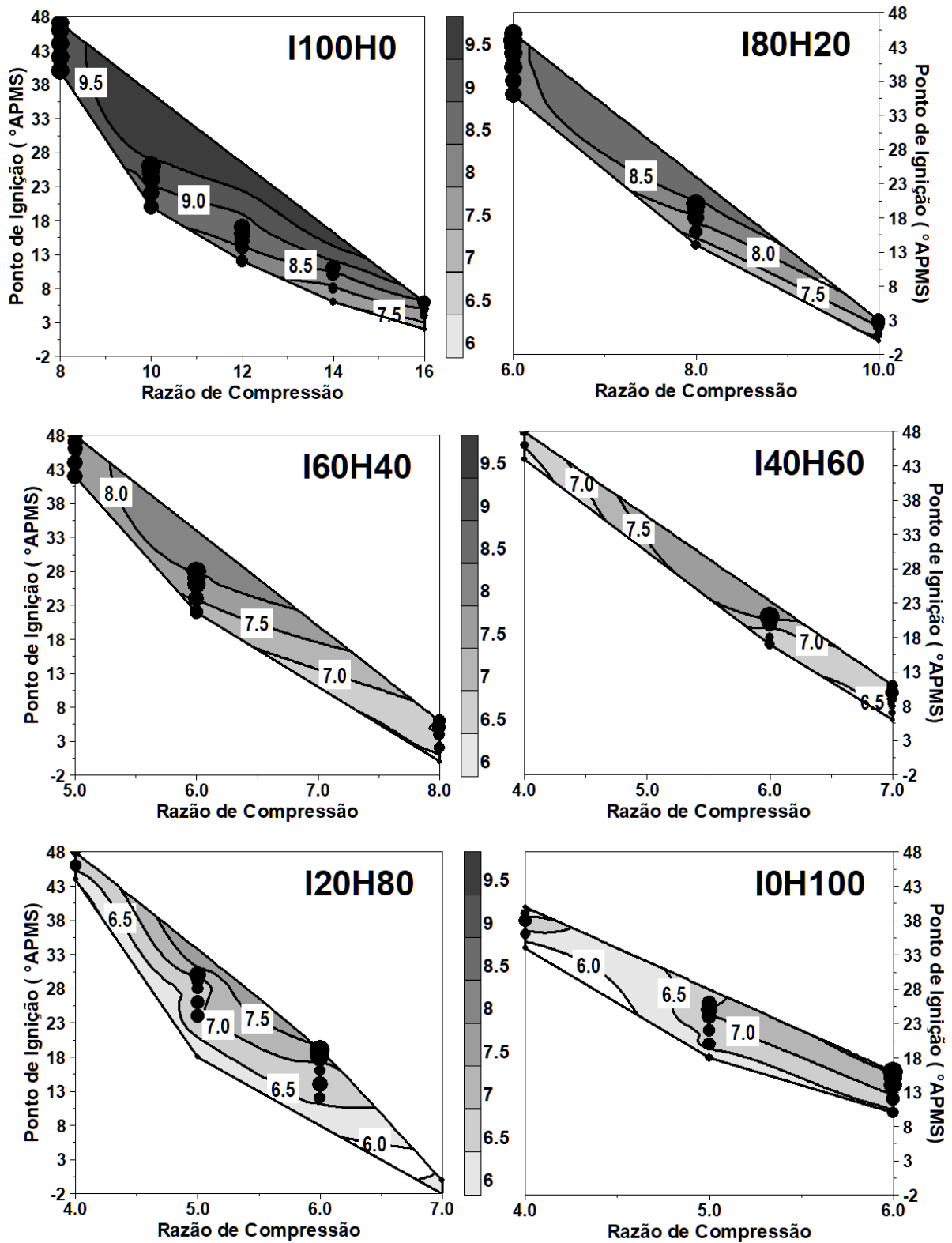


Figura 4.5 - Mapas de IMEP [bar] em função da razão de compressão e do ponto de ignição para cada mistura.

Para as misturas intermediárias I60H40, I40H60 e I20H80, os maiores IMEPs ocorrem nas razões de compressão intermediárias pois o resultado acaba sendo uma mediação entre aumento da razão de compressão e avanço do ponto de ignição. O IMEP tende a ser maior para as razões de compressão mais elevadas devido a maior eficiência de ciclo, porém, ao mesmo tempo, se a razão de compressão for muito alta é impossível avançar minimamente o ponto de ignição para se aproximar do MBT devido a ocorrência de knock muito antecipada. Desta forma, os maiores valores de IMEPs são observados nas razões de compressão intermediárias onde há uma ponderação entre os dois fatores.

A Figura 4.6 ajuda a elucidar essa questão pois ela apresenta a posição do virabrequim (em grau depois do ponto morto superior [$^{\circ}$ DPMS]) na qual 50% da massa de combustível foi queimada (CA 50%). Esse valor foi obtido através do cálculo da fração de massa queimada apresentada na Seção 3.1.6.8. A partir dessa curva é possível encontrar o ponto onde 50% da massa foi queimada.

Segundo Heywood, 1988, o MBT ocorre para valores de CA 50% em torno de 10° DPMS. Este valor condiz com os resultados obtidos neste trabalho pois para a isoctano puro (I100H0) na razão de compressão 8 obtivemos os maiores IMEPs (Figura 4.5) e, conforme a Figura 4.6, nesta mesma condição tivemos o ângulo de virabrequim para 50% da massa queimada em torno de 10° DPMS. No restante dos casos os valores de CA 50% foram mais elevados evidenciando um início tardio da combustão. O início de combustão não pôde ser adiantando nestes casos devido à impossibilidade de avanço do ponto de ignição, limitado pelo início de ocorrência do knock.

Para as demais misturas, os pontos de 50% de massa queimada foram maiores mesmo com o ponto de ignição muito avançado (até 48° APMS). Para o caso extremo do n-heptano puro (I0H100), os pontos de 50% de massa queimada ficaram acima de 30° DPMS. Conforme discutido na Seção 3.1.6.9, devido as menores razões de compressão utilizadas nas misturas intermediárias e no n-heptano puro, a pressão e temperatura da mistura na câmara de combustão é menor no início da combustão aumentando o tempo da fase inicial de desenvolvimento da chama e afastando o ponto de CA 50% do ponto morto superior.

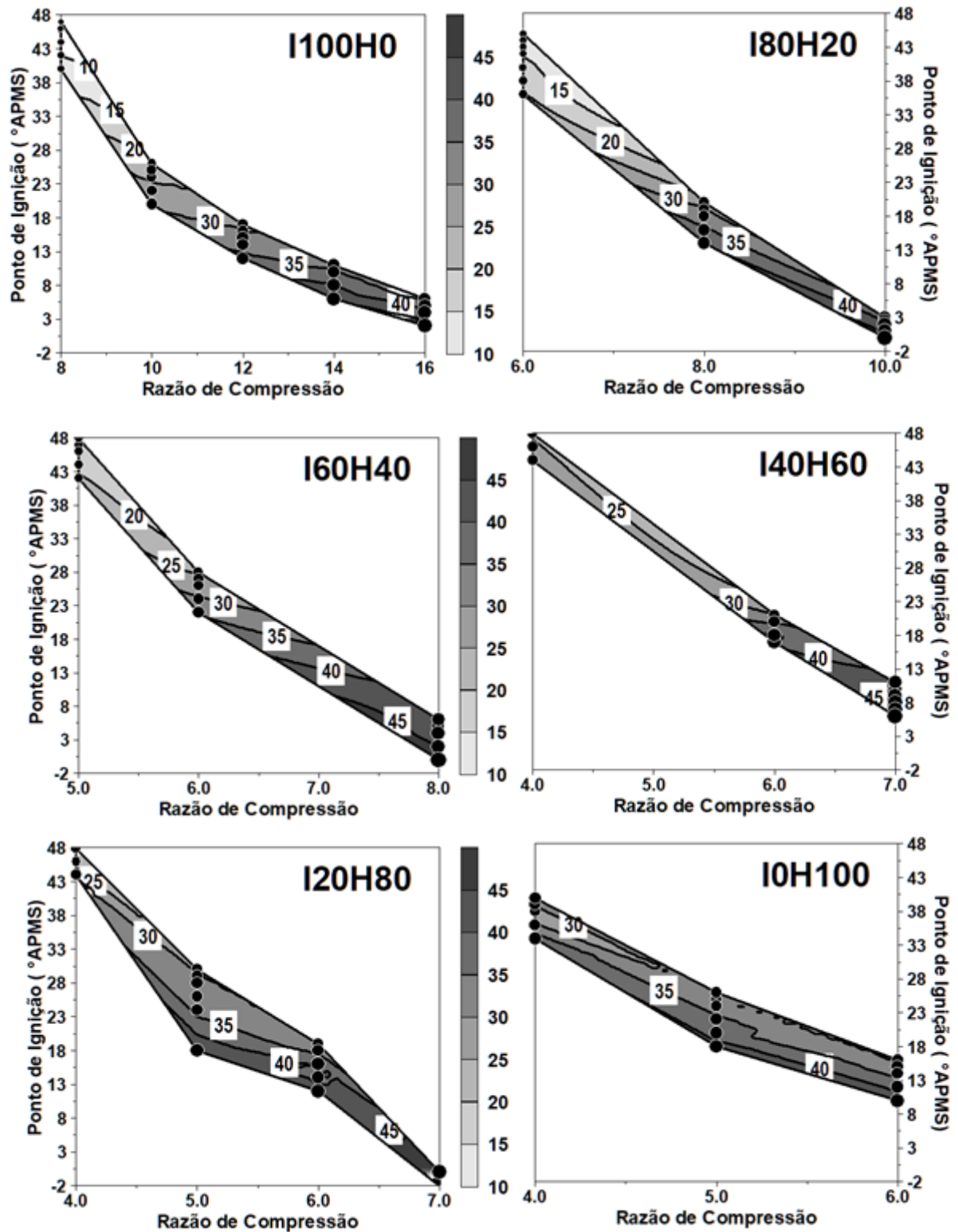


Figura 4.6 - CA 50% [° DPMS]: Posição do virabrequim para 50% da massa de combustível queimada.

A eficiência indicada de conversão de combustível foi calculada conforme descrito na Seção 3.1.6.4 e foram plotados mapas de eficiência em função da razão de compressão (RC) e do ponto de ignição (PI) para cada combustível, conforme apresentado na Figura 4.7.

Para as misturas I100H0, I80H20 e I60H40 a eficiência indicada diminui com o aumento da razão de compressão. Esse resultado parece incoerente visto que a eficiência em ciclos ideais aumenta junto ao aumento da razão de compressão. Porém, conforme discutido acima, para as razões de compressão mais elevadas, o ponto de ignição não alcançou o ponto para o MBT devido a ocorrência de knock prematura e por esse motivo, conforme apresentado na Figura 4.6, o *phasing* da combustão ficou muito deslocado. Por esse motivo, parte da energia não é convertida em trabalho de ciclo acarretando em uma redução na eficiência indicada de ciclo.

Para as misturas I40H60 e I20H80, as maiores eficiências aconteceram para razões de compressão intermediárias pois o resultado acaba sendo uma mediação entre aumento da razão de compressão e avanço do ponto de ignição. A tendência natural é o aumento da eficiência com o aumento da razão de compressão, porém ao ponto que a razão de compressão é muito elevada, o ponto de ignição é afastado do ponto para o MBT devido a ocorrência de knock e o *phasing* da combustão fica muito afetado ocasionando perda de eficiência. Sendo assim, a eficiência é maior em pontos onde há uma ponderação entre aumento da razão de compressão e ponto de ignição mais próximo do MBT.

Para o n-heptano puro (I0H100) a eficiência seguiu a tendência de aumento junto com o aumento da razão de compressão pois, para as razões de compressões menores não foi possível compensar a redução da razão de compressão com o avanço do ponto de ignição devido a ocorrência do knock. Conforme a Figura 4.6 o ponto de 50% de massa queimada ficou muito afastado do ponto morto superior para todas as razões de compressão acarretando em perda de eficiência e, por esse motivo, o aumento da razão de compressão foi o fator preponderante para o aumento da eficiência neste caso.

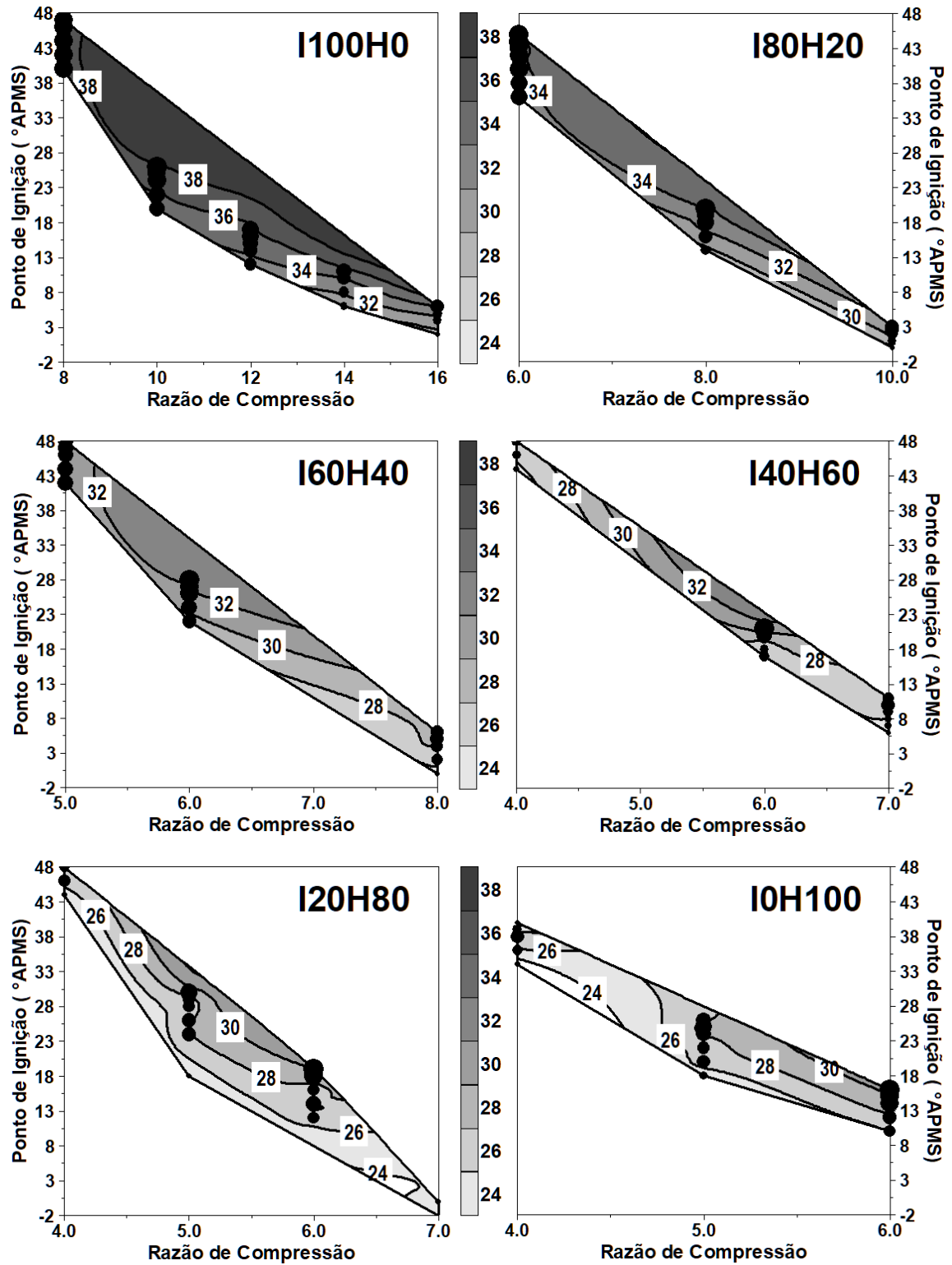


Figura 4.7 - Mapas de eficiência indicada de ciclo [%] em função da razão de compressão e do ponto de ignição para cada mistura.

Conforme a Seção 3.1.6.6 a covariação da pressão média efetiva indicada (COV_{IMEP}) foi calculada e é apresentada na Figura 4.8. Para os combustíveis I100H0 e I80H20, observa-se um aumento do COV_{IMEP} com o aumento da razão de compressão. Essa tendência é semelhante ao ponto de 50% de massa queimada da Figura 4.6 e esse dois parâmetros podem ser associados, pois quanto mais próximo do phasing correto está a combustão, menor é a covariação do IMEP.

Para o I100H0, onde os 50% da fração de massa queimada ficaram em torno de 10° DPMS, o COV_{IMEP} foi menor que 3%. Já na razão de compressão 16, onde o CA50% foi em torno de 40° DPMS, o COV_{IMEP} ficou entre 7% e 8%.

Para os combustíveis com alto teor de n-heptano (I40H60, I20H80 e IOH100) onde as razões de compressões alcançadas foram menores (abaixo de 7), o COV_{IMEP} ficou acima de 9% em todos os pontos chegando a alcançar 23% de variação do IMEP em algumas condições. Para essas misturas de combustível o CA50% ficou acima de 25° DPMS em todos os pontos testados.

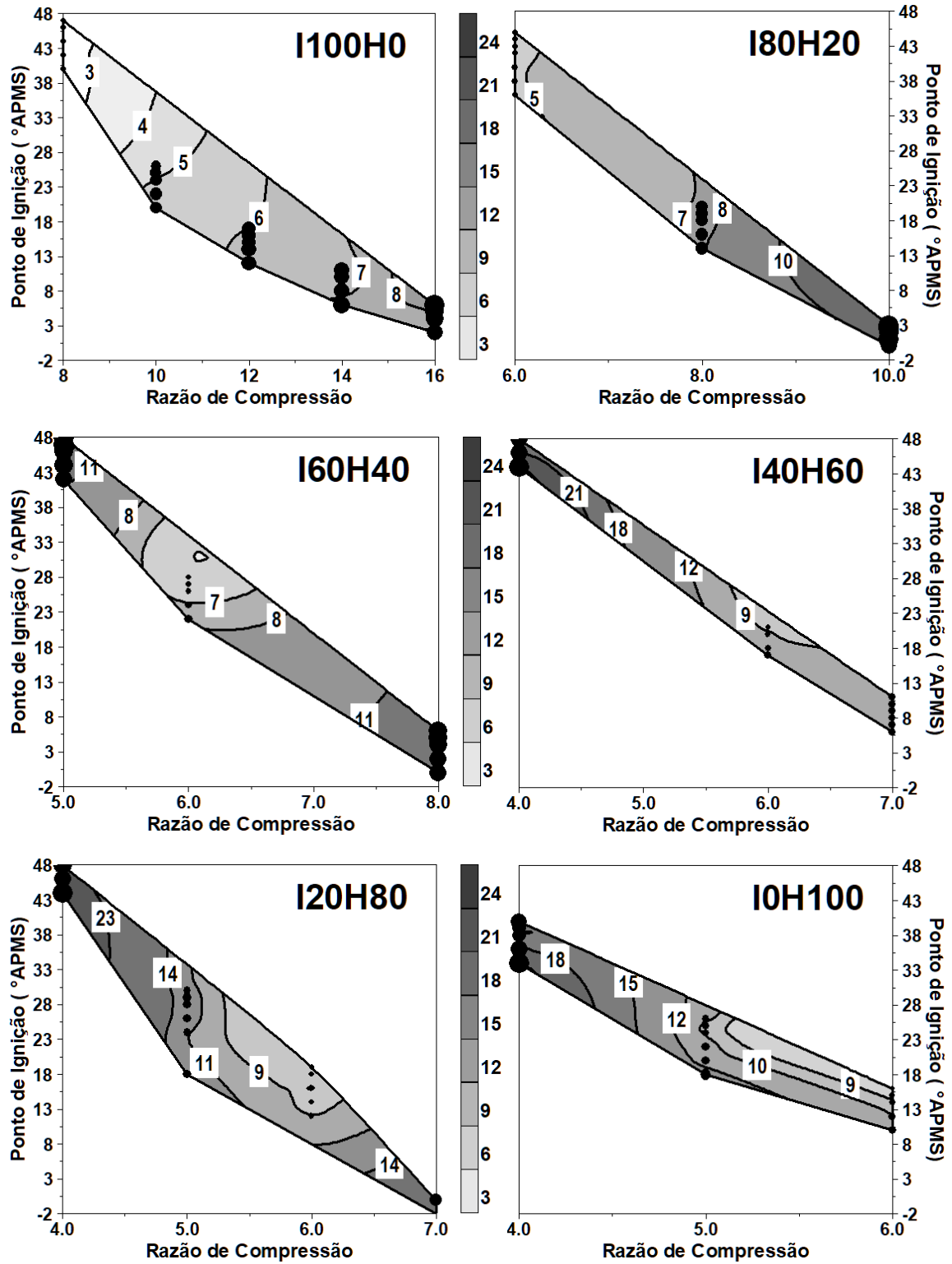


Figura 4.8 - Mapas de COV_{IMEP} [%] em função da razão de compressão e do ponto de ignição para cada mistura.

4.2 Resultados Numéricos

Conforme apresentado na Seção 2.3.1, foi utilizado para as simulações o modelo de duas zonas para motores de ignição por centelha do software Chemkin. Como já discutido na Seção 3.2, a utilização da curva de fração de massa queimada obtida a partir da média dos 200 ciclos adquiridos, mesmo para um ponto de knock audível, não é capaz de detectar a autoignição da fração de massa não queimada. Isso ocorre pois conforme mostrado na Figura 4.1, mesmo para um ponto de operação contendo ciclos de elevado grau de knock, a maioria dos ciclos ainda apresenta combustão normal, logo a média dos ciclos se aproxima de uma curva para combustão normal.

Para simular e avaliar a evolução das principais espécies de interesse na zona não queimada ao longo da combustão dentro do cilindro, encontrou-se uma curva de fração de massa queimada capaz de gerar autoignição para todas as misturas de combustível utilizadas neste trabalho. A curva utilizada para alimentar o modelo computacional é apresentada na Figura 4.9.

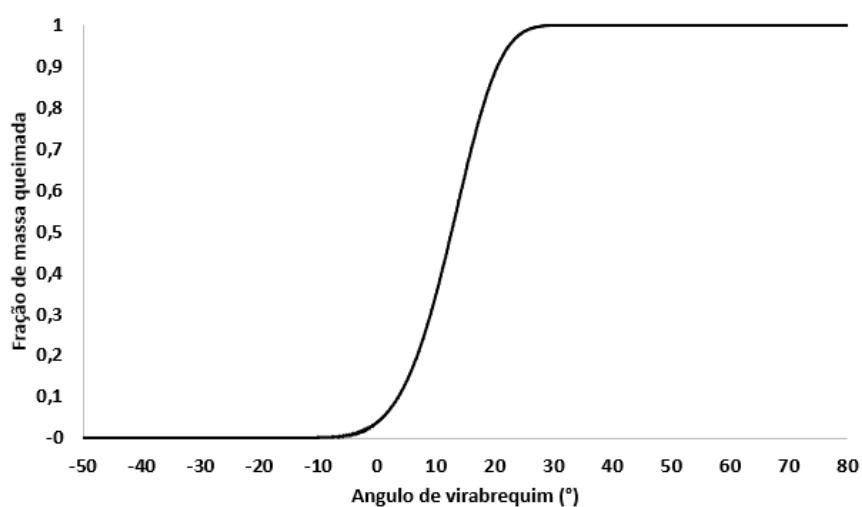


Figura 4.9 - Curva de fração de massa queimada utilizada no modelo computacional.

Conforme apresentado na Seção 3.2, o modelo computacional deriva a velocidade de propagação da chama a partir dessa curva de fração de massa queimada. Para efeito comparativo, foram utilizados como combustível misturas de isoctano e n-heptano nos

mesmos percentuais utilizados nos testes experimentais e foi utilizada a mesma curva de fração de massa queimada da Figura 4.9 para a combustão de todas as misturas simuladas. Optou-se por essa metodologia pois o intuito foi avaliar apenas os efeitos do combustível na autoignição da mistura não queimada sendo que desta forma a velocidade de consumo das espécies antes de ocorrer uma provável autoignição fosse a mesma. Essa autoignição que pode vir a ocorrer é detectada pelo modelo computacional pois há um mecanismo de cinética química regendo o consumo das espécies na região não queimada.

A Figura 4.10 apresenta o ângulo de virabrequim no qual ocorreu a autoignição bem como a fração de massa ainda não queimada no momento da autoignição para cada um dos combustíveis simulados.

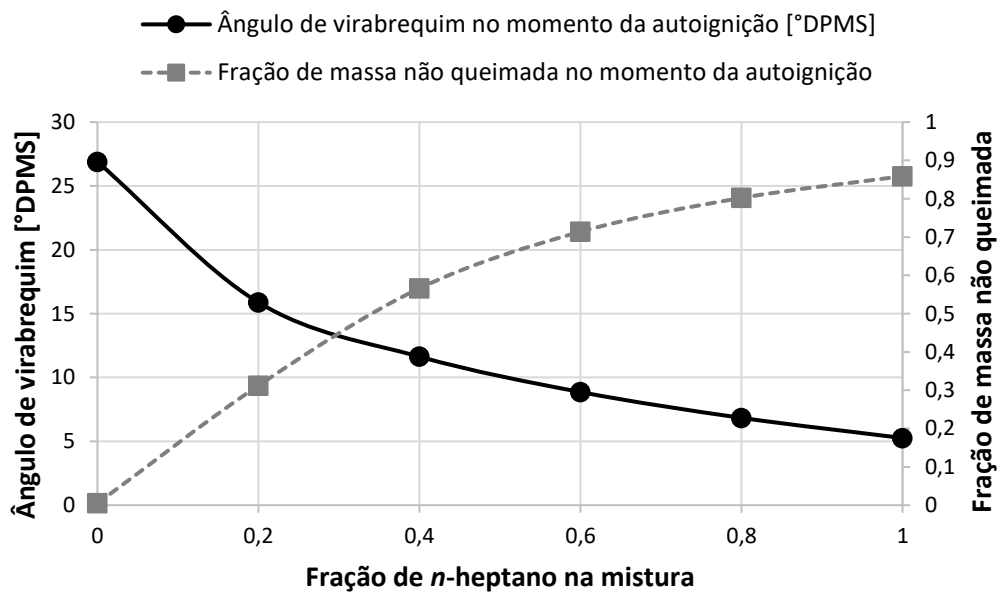


Figura 4.10 - Ângulo de virabrequim e fração de massa não queimada no momento da autoignição para diferentes misturas de isooctano e n-heptano.

Observa-se a tendência de ocorrência da autoignição mais cedo com o aumento da fração de n-heptano na mistura. Ao mesmo tempo, a fração de massa não queimada que entra em autoignição cresce com o aumento de n-heptano na mistura. Para a fração de n-heptano igual a zero, que se refere ao combustível isooctano puro, observa-se que a autoignição ocorreu em 26,89° DPMS e que apenas 0,49% de massa não queimada restante no cilindro entrou em

autoignição. Já para o n-heptano puro, 85,88% da massa ainda não havia queimado no momento da autoignição, a qual ocorreu em 5,26° DPMS.

Essa primeira análise mostra a maior resistência do isooctano à autoignição pois ela ocorre mais tarde para os menores percentuais de n-heptano na mistura (consequentemente para os maiores percentuais de isooctano), ou seja, o tempo para a propagação da chama ocorrer é maior quando o combustível contém mais isooctano na mistura e dessa forma, há a possibilidade de a combustão ocorrer normalmente até o final sem a ocorrência de autoignição. Além disso, as frações de massa não queimada no momento da ignição são menores para percentuais de isooctano maiores. Como a intensidade do knock é proporcional à quantidade de mistura que entra em autoignição, ela será menor para percentuais de isooctano maiores.

A Figura 4.11 apresenta a fração mássica de algumas espécies em função do ângulo de virabrequim ao longo da combustão no modelo computacional. Podemos observar que para o isooctano puro a formação de iC_4H_8 começa mais cedo e em maiores percentuais. Como apresentado na Seção 2.2.2.1 esta é uma espécie importante no atraso da autoignição pois ela retarda a decomposição das espécies em outras espécies elementares de reatividade mais elevada. Conforme o percentual de isooctano da mistura é substituído por n-heptano, a formação de iC_4H_8 reduz e aumenta a produção de etileno (C_2H_4). Esta espécie por sua vez é altamente reativa o que faz com que a autoignição ocorra mais cedo. Ao ocorrer mais cedo, um percentual maior de massa ainda não queimada entra em ignição (Figura 4.10) e consequentemente um aumento local de pressão elevado gera uma alta intensidade de knock no cilindro do motor.

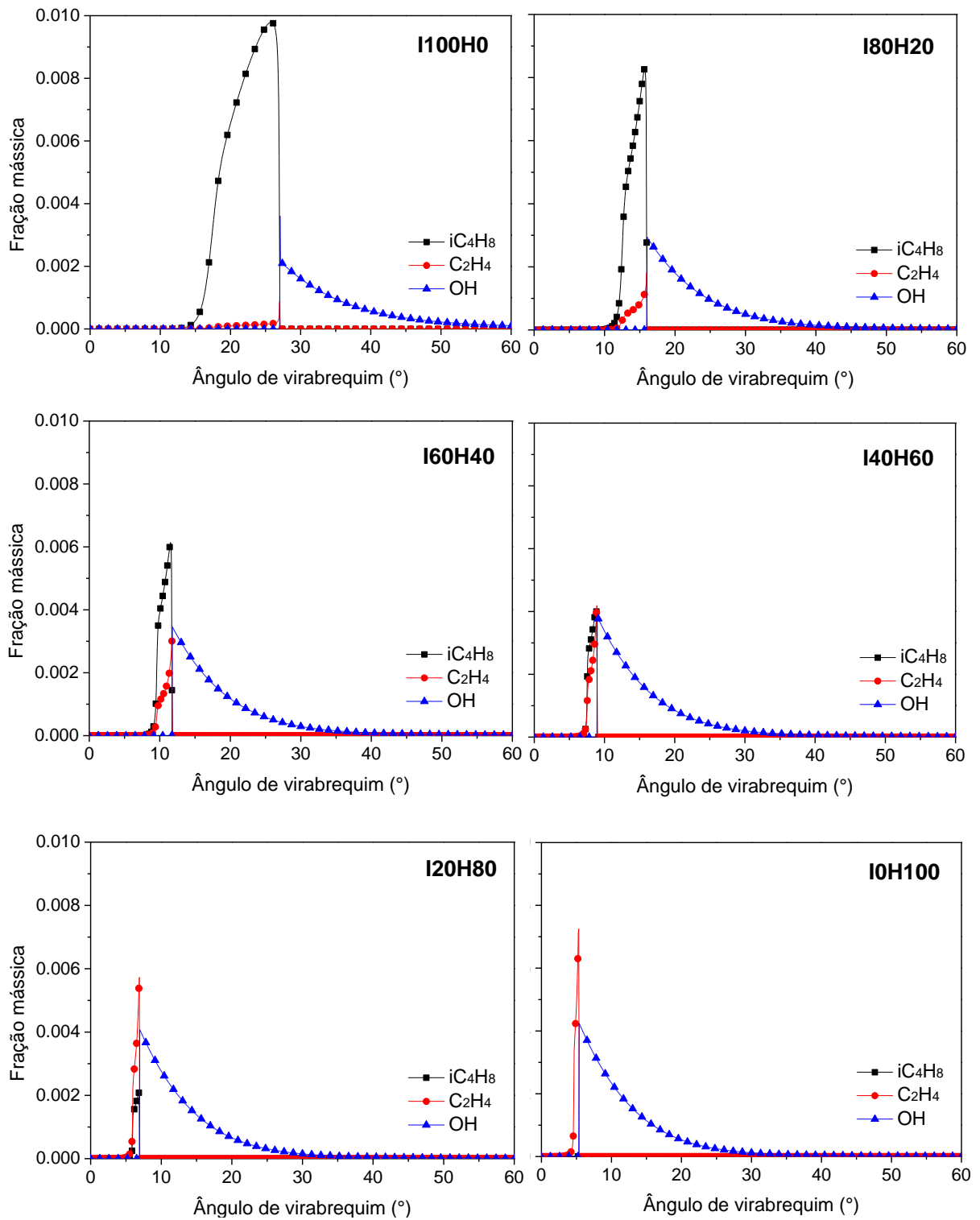


Figura 4.11 - Simulação da evolução das principais espécies químicas ao longo da combustão na zona não queimada para diferentes misturas de isooctano e n-heptano.

5 CONCLUSÕES

Concluimos neste estudo que devido a variabilidade cíclica inerente aos motores de combustão interna, o knock possui uma característica estocástica, ou seja, mesmo o motor estando em uma condição de knock até audível, o fenômeno não ocorre na maioria dos ciclos e nos ciclos em que se observa o knock ele tem intensidades diferentes. Esse fator torna importante encontrar uma maneira de detecção de intensidade de knock que considere esse fator estatístico de número de ciclos e de intensidade de knock em uma condição específica de operação do motor. O fator de knock calculado através do método estocástico se mostrou uma boa ferramenta para esta tarefa pois foi possível identificar com mais coerência as intensidades do knock para condições específicas de trabalho do motor. Quando comparado ao método de contagem do número de ciclos para os quais há ocorrência de knock, o fator de knock mostrou-se mais eficaz pois, em casos onde houve poucos ciclos com knock mas com intensidades muito elevadas, o fator de knock apresentou magnitudes também elevadas.

Alem disso, como o estudo de knock é importante para melhorar a eficiência dos motores de combustão interna pois assim temos a possibilidade de controlar e mitigar esse fenômeno a fim de expandir a faixa de operação de alta eficiência de um motor de combustão interna, concluiu-se que o uso de simulação computacional para essa tarefa é uma importante ferramenta que possibilita prever o knock nos motores a auxiliar nesse objetivo. Nesse sentido, os mecanismos de cinética química são muito importantes nesta tarefa pois permitem identificar a autoignição da fração de mistura não queimada dentro do cilindro.

Concluiu-se ainda que a característica de o knock não ocorrer em todos os ciclos mesmo em uma condição potencialmente danosa ao motor, dificulta a previsão de sua ocorrência em simulações computacionais. Foi observado que ao utilizar-se na simulação computacional com o modelo de duas zonas do software Chemkin, a curva de fração de massa queimada da média dos 200 ciclos do motor, mesmo em uma condição de elevado fator de knock, a autoignição da fração de massa não queimada não ocorria no modelo. A razão é que a média de todos os ciclos retorna uma curva de fração de massa queimada característica de uma combustão normal. Desta forma, ao serem separados apenas os ciclos com alta intensidade de knock e a partir deles realizar-se a simulação computacional, a autoignição da mistura não queimada foi captada pelo modelo. Sendo assim, ao utilizar-se o modelo de duas zonas, seja para prever ou identificar o

knock em um motor de combustão interna, os efeitos de variabilidade ciclica do motor, que dão ao knock uma característica estocástica devem ser considerados.

Além disso, foi identificado na simulação computacional as diferentes rotas de formação de subprodutos quando utilizado o isooctano e o n-heptano como combustível. A partir do mecanismo de cinética química foi possível verificar uma formação antecipada de elementos altamente reativos, como o C_2H_4 , quando utilizado combustíveis com maior teor de n-heptano como combustível. Esses elementos reativos que se formam mais cedo desencadeiam um consumo rápido das espécies presentes na zona não queimada e atingem a autoignição mais cedo quando comparado as misturas com maior percentual de isooctano.

6 BIBLIOGRAFIA

Annand, W. J. D. **Heat Transfer in the Cylinders of Reciprocating Internal Combustion Engines**. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, 1963.

ASTM/D2699. **Standard Test Method for Research Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel**. Annual Book of ASTM Standards. s.d., 2017.

ASTM/D2700. **Standard Test Method for Motor Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel**. Annual Book of ASTM Standards. s.d., 2017.

Barazzoni, L., Sangeorzan, B., and DelVescovo, D. **Modelling of a Discrete Variable Compression Ratio (VCR) System for Fuel Consumption Evaluation - Part 1: Model Development**. SAE Technical Paper 2019-01-0467, 2019.

Bozza, F., De Bellis, V., and Teodosio, L. **A Tabulated-Chemistry Approach Applied to a Quasi-Dimensional Combustion Model for a Fast and Accurate Knock Prediction in Spark-Ignition Engines**. SAE Technical Paper 2019-01-0471, 2019.

Cancino, L. R., Fikri, M., Oliveira, A. A. M., Schulz, C. **Autoignition of gasoline surrogate mixtures at intermediate temperatures and high pressures: Experimental and numerical approaches**. Proceedings of the Combustion Institute, 2009.

Cho, S., Oh, S., Song, C., Shin, W. et al. **Effects of Bore-to-Stroke Ratio on the Efficiency and Knock Characteristics in a Single-Cylinder GDI Engine**. SAE Technical Paper 2019-01-1138, 2019.

Chun, Kwang Min, and John B. Heywood. **Estimating Heat-Release and Mass-of-Mixture Burned from Spark-Ignition Engine Pressure Data**. Combustion Science and Technology, 54 (1–6): 133-43, 1987.

Goryntsev, D., Tap, F., Tvrdovic, M., and Priesching, P. **SI Engine Combustion and Knock Modelling Using Detailed Fuel Surrogate Models and Tabulated Chemistry**. SAE Technical Paper 2019-01-0205, 2019.

Hosogi, T., Kaneko, R., Ito, H., and Sunami, K. **Research of Knocking Deterioration due to Accumulated Carbon Deposits on Piston Surfaces.** SAE Technical Paper 2019-01-1141, 2019.

J.A. VAN OIJEN & L.P.H. DE GOEY. **Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds.** Combustion Science and Technology, 161:1, 113-137, 2000.

Jung, D. **Autoignition and Chemical-Kinetic Mechanisms of Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion for the Fuels with Various Autoignition Reactivity.** Advanced Chemical Kinetics, 2017.

Kim, N., Vuilleumier, D., Sjöberg, M., Yokoo, N. et al. **Using Chemical Kinetics to Understand Effects of Fuel Type and Compression Ratio on Knock-Mitigation Effectiveness of Various EGR Constituents.** SAE Technical Paper 2019-01-1140, 2019.

Leppard, W. R. **Individual-Cylinder Knock Occurrence and Intensity in Multicylinder Engines.** International Congress & Exposition Detroit, Michigan, 1982.

Lonari, Y., Polonowski, C., Naber, J., and Chen, B. **Stochastic Knock Detection Model for Spark Ignited Engines.** SAE Technical Paper 2011-01-1421, 2011.

Mackay, Donald, Wan Ying Shiu, Kuo-ching Ma, and Sum Chi Lee. **Handbook of Physico-Chemical Properties and Environmental Fate for Organic Chemicals.** Chemphyschem: A European Journal Of Chemical Physics And Physical Chemistry, Second Ed. Vol. I. Boca R. s.d., 2006.

Mamala, J., Graba, M., Praznowski, K., and Hennek cEng., K. **Control of the Effective Pressure in the Cylinder of a Spark-Ignition Engine by Electromagnetic Valve Actuator.** SAE Technical Paper 2019-01-1201, 2019.

Mane, P., Pendovski, D., Sonnen, S., Uhlmann, A. et al. **Coupled Dynamic Simulation of Two Stage Variable Compression Ratio (VCR) Connecting Rod Using Virtual Dynamics.** SAE Int. J. Adv. & Curr. Prac. in Mobility 1(1):38-44, 2019.

McKenzie, J., Cheng, W. K. **The anatomy of knock**. SAE Paper 2016-01-0704, 2016.

Mendler, C. and Gravel, R. **Variable Compression Ratio Engine**. SAE Technical Paper 2002-01-1940, 2002.

Miyoshi, Akira. **Chemical Kinetic Analysis on the Effect of the Occurrence of Cool Flame on SI Knock**. International Journal of Automotive Engineering, 130-136, 2017.

Naber, J. D., Rajagopalan, S. R. **Combustion Knock Detection and Control through Statistical Characterization of Knock Levels**. US Patent 2008/0051981 A1, 2008.

Naik, C., Puduppakkam, K., and Meeks, E. **Impact of Aromatics on Engine Performance**. SAE Technical Paper 2019-01-0948, 2019.

Parra, S., Felipe A. **Improvement of a knock model for natural gas SI engines through heat transfer evaluation**. International Journal on Interactive Design and Manufacturing (IJIDeM), pp 1423–1433, 2018.

Pepiot, P. **Development, Analysis, and Systematic Reduction of Chemical Mechanisms for Surrogate Fuels**. <http://web.stanford.edu/group/pitsch/Research/SurrogateFuels.htm>, Acesso em: 22/10/2020.

Polonowski, C. **Stochastic knock detection program: phase 2**. Michigan Technological University, 2008.

Pulpeiro Gonzalez, J., Shah, A., Hoth, A., Rockstroh, T. et al. **Statistical Analysis of Fuel Effects on Cylinder Conditions Leading to End-Gas Autoignition in SI Engines**. SAE Technical Paper 2019-01-0630, 2019.

Ragland, Kenneth W., and Kenneth M. Bryden. **Combustion Engineering**. Second Ed. CRC Press Taylor & Francis Group. s.d., 2011.

Ren, Y., Randall, R. B., Milton B. E. **Influence of the resonant frequency on the control of knock in diesel engines**. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part D, Journal of Automobile Engineering, 1999.

Romero, C. and Henao Castañeda, E. **Developing Small Variable Compression Ratio Engines for Teaching Purposes in an Undergraduate Program.** SAE Technical Paper 2019-01-0331, 2019.

Shao, J., Rutland, J. C. **Modeling Investigation of Different Methods to Suppress Engine Knock on a Small Spark Ignition Engine.** Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 2015.

Shi, H., Al Mudraa, S., and Johansson, B. **Variable Compression Ratio (VCR) Piston - Design Study.** SAE Technical Paper 2019-01-0243, 2019.

Singh, E., Hlaing, P., Shi, H., and Dibble, R. **Effect of Different Fluids on Injection Strategies to Suppress Pre-Ignition.** SAE Technical Paper 2019-01-0257, 2019.

Sitkei, G. and Ramanaiah, G. **A Rational Approach for Calculation of Heat Transfer in Diesel Engines.** SAE Technical Paper 720027, 1972.

Tie Li, Tao Yin, Bin Wang. **A phenomenological model of knock intensity in spark-ignition engines.** Energy Conversion and Management, 2017.

Turns, Stephen R. **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications.** McGraw-Hill, 2011.

Wallace, W. A., Lux F. B. **A Variable Compression Ratio Engine Development.** SAE International, 1963.

Wang, Z., Li, F., Wang, Y. **A generalized kinetic model with variable octane number for engine knock prediction.** Fuel, 2017.

Wang, Z., Liu, H., Reitz R. D. **Knocking combustion in spark-ignition engines.** Progress in Energy and Combustion Science, pág 78-112, 2017.

Wu, G. **A Real Time Statistical Method for Engine Knock Detection.** SAE Technical Paper 2007-01-1507, 2007.

Zhang, K., Banyon, C., Bugler, J., Curran, H. J., et al. **An updated experimental and kinetic modeling study of n-heptane oxidation.** *Combustion and Flame*, 2016.