



UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO – UFOP
ESCOLA DE MINAS
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA



LUANA IZZICUPO BORGES

**AVALIAÇÃO TÉCNICA DO USO DE BIODIESEL EM UM MOTOR DE
COMBUSTÃO INTERNA ATRAVÉS DOS *SOFTWARES CHEMICAL EQUILIBRIUM
WITH APPLICATIONS E DIESEL-RK***

OURO PRETO - MG

2021

LUANA IZZICUPO BORGES
Luana.borges@aluno.ufop.edu.br

**AVALIAÇÃO TÉCNICA DO USO DE BIODIESEL EM UM MOTOR DE
COMBUSTÃO INTERNA ATRAVÉS DOS *SOFTWARES CHEMICAL EQUILIBRIUM
WITH APPLICATIONS E DIESEL-RK***

Monografia apresentada ao Curso de Graduação
em Engenharia Mecânica da Universidade
Federal de Ouro Preto como requisito para a
obtenção do título de Engenheira Mecânica.

Professor orientador: DSc. Elisangela Martins Leal

OURO PRETO – MG

2021

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

B732a Borges, Luana Izzicupo .

Avaliação técnica do uso de biodiesel em um motor de combustão interna através dos softwares Chemical Equilibrium with Applications e Diesel-RK. [manuscrito] / Luana Izzicupo Borges. - 2021.

71 f.: il.: color., gráf., tab..

Orientadora: Profa. Dra. Elisangela Leal.

Monografia (Bacharelado). Universidade Federal de Ouro Preto. Escola de Minas. Graduação em Engenharia Mecânica .

1. Energia. 2. Combustão. 3. Sustentabilidade. 4. Biodiesel. 5. Software - Chemical Equilibrium with Applications (CEA). 6. Software - Diesel-RK. 7. Motores de combustão interna. I. Leal, Elisangela. II. Universidade Federal de Ouro Preto. III. Título.

CDU 621

Bibliotecário(a) Responsável: Maristela Sanches Lima Mesquita - CRB-1716



FOLHA DE APROVAÇÃO

Luana Izzicupo Borges

Avaliação técnica do uso de biodiesel em um motor de combustão interna através dos softwares *Chemical Equilibrium with Applications* e *Diesel-RK*

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Mecânica da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Engenheira Mecânica

Aprovada em 10 de agosto de 2021

Membros da banca

D.Sc. Elisângela Martins Leal - Orientadora - Universidade Federal de Ouro Preto
D.Sc. Luís Antônio Bortolaia - Universidade Federal de Ouro Preto
D.Sc. Claudio Marcio Santana - Universidade Federal de Ouro Preto
Eng. Wilian Nascimento Silva - Universidade Federal de Ouro Preto

Elisângela Martins Leal, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de Conclusão de Curso da UFOP em 18/08/2021



Documento assinado eletronicamente por **Elisângela Martins Leal, PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 18/08/2021, às 07:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Claudio Marcio Santana, PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 19/08/2021, às 00:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0206842** e o código CRC **EA2D309C**.

Dedico esse trabalho a minha família, por serem meu exemplo e suporte de vida, aos meus amigos pela parceria e por tornarem os anos de graduação mais leves.

AGRADECIMENTOS

Expressar gratidão significa dar as boas-vindas ao que nos ocorre no presente, sejam as situações agradáveis ou não, sejam os significados de desafios ou de tempestades. Gratidão é sair de nós mesmos, de nossos recuos internos e de nossas necessidades pessoais para se colocar à disposição das outras pessoas. Estar grato constantemente é ainda reconhecer a permanência das coisas e reconhecer e gratificar o que temos hoje.

Gratidão, primeiramente aos meus pais, Adriana e Paulo, por nunca pouparem esforços para que eu chegasse aonde estou, por todo apoio, conselhos, compreensão, companheirismo e amor. Obrigada por sempre me incentivarem para que tudo fosse alcançado com muita responsabilidade, honestidade e para que eu nunca desistisse diante das dificuldades.

Gratidão aos meus avós por sempre estarem do meu lado, por todo carinho e ensinamentos, em especial ao vô Vincenzo (*in memoriam*) e vó Joana. Aos meus irmãos, Paola e Leandro, pelo companheirismo e apoio mesmo a distância.

Gratidão a todos meus amigos que estiveram comigo durante essa jornada, sempre me incentivando e apoiando nas mais difíceis decisões e por tornarem essa caminhada mais leve e alegre.

Gratidão a todo corpo docente da Engenharia Mecânica, em especial à Elisângela Martins Leal, por todos ensinamentos, críticas, sugestões, paciência e pela amizade que foram fundamentais para realização desta monografia. Aos futuros colegas de profissão por todo apoio e estudo durante o curso.

Por fim, à UFOP e à Escola de Minas pelo ensino gratuito e de extrema qualidade.

“Sua tarefa é descobrir o seu trabalho e, então, com todo o coração, dedicar-se a ele.”

Buda

RESUMO

BORGES, Luana Izzicupo. Avaliação técnica do uso de biodiesel em um motor de combustão interna através dos *softwares Chemical Equilibrium with Applications* e *Diesel-RK*. Monografia (Graduação em Engenharia Mecânica). Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto, 71 páginas. 2021.

A utilização de combustíveis não renováveis pretendendo suprir a alta demanda energética, causaram danos ambientais sérios e de grandes proporções. Considerando os impactos ambientais, com destaque à produção e o consumo de energia, alternativas para a substituição de forma sustentável tornaram-se essenciais. A saída ideal é a permuta do combustível fóssil por um combustível limpo. O biodiesel é uma alternativa plausível de redução do impacto do efeito estufa e quando comparada ao diesel possui vantagens, como maior biodegradabilidade, redução da emissão de gases, maior poder lubrificante, maior ponto de fulgor, entre outros. Além disso, as semelhanças fluido e termodinâmicas também tornam equivalentes o desempenho e consumo, e demandam apenas algumas transformações, evidenciando a adaptabilidade aos motores do ciclo diesel. A maioria das características, quando comparadas ao diesel, durante a combustão no motor é em favor do biodiesel escolhido, como maior número de cetano e maior massa específica. Porém desfavoráveis devido a sua maior viscosidade e menor lubrificidade. A combustão do diesel traz como os principais poluentes o NO_x, o monóxido de carbono (CO) e os hidrocarbonetos não queimados (UHC). O uso de biodiesel pode resultar em benefícios pela diminuição das emissões de CO, UHC e MP. Neste cenário, o objetivo geral deste trabalho é avaliar tecnicamente o uso de biodiesel em um motor de combustão interna com vistas a geração de energia e sustentabilidade por meio dos *softwares Chemical Equilibrium with Applications* e *Diesel RK*. Ainda, o estudo do comportamento dentro do motor de combustão em ciclo diesel é primordial para validação do uso do biocombustível, sendo esse feito por meio do *software Diesel-RK*. Portanto, este projeto tem como intuito contribuir para a redução da dependência energética dos motores de combustão interna pelos combustíveis fósseis, e conseqüentemente, com a redução dos impactos ambientais visando a sustentabilidade.

Palavras-chave Energia, combustão, sustentabilidade, biodiesel, motor de ignição por compressão, *software Chemical Equilibrium with Applications*, *software Diesel-RK*.

ABSTRACT

BORGES, Luana Izzicupo. Technical evaluation of the use of biodiesel in an internal combustion engine using Chemical Equilibrium with Applications and Diesel-RK software. Monograph (Bachelor degree in Mechanical Engineering). School of Mining, Federal University of Ouro Preto, 71 pages. 2021.

The use of non-renewable fuels to supply the high energy demand has caused serious environmental damage of great proportions. Considering the environmental impacts, with emphasis on the production and consumption of energy, alternatives for substitution in a sustainable way have become essential. The ideal solution is the exchange of fossil fuel for a clean fuel. Biodiesel is a plausible alternative for reducing the impact of the greenhouse effect, and when compared to diesel it has advantages, such as greater biodegradability, reduced gas emissions, greater lubricating power, higher flash point, among others. Besides this, the fluid and thermodynamic similarities also make performance and consumption equivalent, and require only a few transformations, evidencing its adaptability to diesel cycle engines. Most of the characteristics, when compared to diesel, during combustion in the engine are in favor of the chosen biodiesel, such as higher cetane number and higher specific mass. But unfavorable due to its higher viscosity and lower lubricity. The combustion of diesel brings as main pollutants NO_x, carbon monoxide (CO) and unburned hydrocarbons (UHC). The use of biodiesel can result in benefits by reducing CO, UHC and PM emissions. In this scenario, the general objective of this work is to technically evaluate the use of biodiesel in an internal combustion engine with a view to energy generation and sustainability through the software Chemical Equilibrium with Applications and Diesel RK. Furthermore, the study of the behavior inside the diesel cycle combustion engine is paramount to validate the use of biofuel, and this is done through the Diesel-RK software. Therefore, this project aims to contribute to the reduction of energy dependence of internal combustion engines by fossil fuels, and consequently, with the reduction of environmental impacts aiming at sustainability.

Keywords: *Energy, combustion, sustainability, biodiesel, compression ignition engine, Chemical Equilibrium with Applications software, Diesel-RK software.*

LISTA DE SÍMBOLOS

C_p : Calor específico a pressão constante [J/(kg.K)]
 \dot{m} : Vazão Mássica [kg/s]
 η_{comb} : Eficiência da Combustão [%]
h: Entalpia do Gás na Saída do Combustor [J]
P: Pressão [bar]
T: Temperatura [K]
PCI: Poder Calorífico do Combustível [Kcal/Kg]
MP: Material Particulado
CO: Monóxido de Carbono
HC: Hidrocarbonetos
CO₂: Dióxido de Carbono
H₂O: Água
SO₂: Dióxido de enxofre
N₂: Nitrogênio
O₂: Oxigênio
NO: Óxido Nitríco
CH₂: Etileno
RPM: Velocidade do motor
P_{eng}: Potência do motor [kW]
BMEP: Pressão Média Efetiva [kPa]
m_f: Massa de combustível fornecida por ciclo [g]
SFC: Consumo de combustível específico [kg/kWh]
Eta_f: Eficiência do motor
IMEP: Pressão média efetiva indicada [bar]
Eta_i: Eficiência indicada
Sp: Velocidade média do pistão [m/s]
FMEP: Pressão média efetiva de atrito [bar]
Eta_m: Eficiência mecânica
p_{max}: Pressão máxima no cilindro [kPa]
T_{max}: Temperatura máxima no cilindro [K]
p_{inj.max}: Pressão de injeção [kPa]
SMD: Diâmetro de Sauter [microns]

SOI: Tempo de Ignição

Phi_inj: Duração da injeção [° CA]

Phi_ign: Período de atraso da ignição [°]

SOC: Início da combustão [° PMS]

Phi_z: Duração da combustão [°]

Theta_i: Tempo de Injeção relacionado ao SFC

p_max: Pressão Máxima do Cilindro

dp/dTheta: Taxa Máxima de Aumento de Pressão

PRC_{Tmax} : Relação de pressão do compressor em regime de potência máxima

PRC_{Pmax} : Relação de pressão do compressor ao regime de torque máximo

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Produção mensal de biodiesel no Brasil.....	6
Figura 2. Energia química nas reações de combustão.	12
Figura 3. Velocidade de ignição em relação ao percentual do ar teórico	16
Figura 4. Estágios de desenvolvimento e sua relação com o consumo diário de energia.	19
Figura 5. Ciclo aberto do carbono do diesel e ciclo fechado do carbono do biodiesel.	23
Figura 6. Reação de transesterificação de óleos vegetais e/ou gorduras animais.....	25
Figura 7. Esquema de comparação das propriedades dos combustíveis com os possíveis efeitos no motor.....	27
Figura 8. Representação do primeiro e segundo tempo do motor do ciclo diesel.	28
Figura 9. Representação do terceiro e quarto tempo do motor do ciclo diesel.....	29
Figura 10. Variação das emissões de poluentes (HC, CO e NO _x) em função da adição de biodiesel.....	30
Figura 11. Tela inicial do <i>software CEA NASA</i>	33
Figura 12. Tela inicial do <i>software Diesel-RK</i>	36
Figura 13. Fluxograma das etapas da realização do trabalho.	39
Figura 14. Variação da viscosidade cinemática para diesel metropolitano (B0), biodiesel (B100) de sebo e misturas.....	45
Figura 15. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre ($\phi=0,8$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no Jet-A.	47
Figura 16. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão rica ($\phi=1,2$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no Jet-A.	48
Figura 17. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre ($\phi=0,8$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no biodiesel de sebo bovino.	50

Figura 18. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão rica ($\phi=1,2$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no biodiesel de sebo bovino.	50
Figura 19. Comparação do percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre ($\phi=0,8$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) dos fluidos biodiesel de sebo bovino e diesel (Jet-A).	51
Figura 20. Comparação do percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão rica ($\phi=1,2$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) dos fluidos biodiesel de sebo bovino e Jet-A.	52
Figura 21. Resultados teóricos da fração molar em função da razão de equivalência para pressão de operação de 1 a 5 atm (101,325 kPa a 506,63 kPa) para as espécies CO e CO ₂	54
Figura 22. Comparação dos parâmetros de eficiência e potência dos combustíveis Diesel D100, Biodiesel SME B100, Mistura B40D60 e Mistura B20D80.	56
Figura 23. Influência da pressão média efetiva sobre as emissões de particulados de Hartridge e o número de particulados de Bosch.	59
Figura 24. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Diesel nº 2 (D100) em relação ao ângulo no virabrequim.	60
Figura 25. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Biodiesel SME B100 em relação ao ângulo no virabrequim.	61
Figura 26. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Biodiesel SME B40D60 em relação ao ângulo no virabrequim.	62
Figura 27. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Biodiesel SME B20D80 em relação ao ângulo no virabrequim.	62
Figura 28. Parâmetros do cilindro: pressão, temperatura e volume para o combustível para o Diesel nº 2 (D100) em relação ao ângulo no virabrequim.	63
Figura 29. Visualização do spray do combustível Diesel nº 2.	64

Figura 30. Relação entre a potência efetiva, pressão máxima no cilindro, taxa de aumento de pressão e o consumo específico de combustível na injeção de combustível com potência máxima.	66
Figura 31. Relação entre o consumo específico de combustível, a máxima pressão do cilindro e o torque no tempo de injeção de combustível no máximo regime de torque.	68
Figura 32. Tela preenchimento dados de entrada do <i>software CEA NASA</i>	79
Figura 33. Tela preenchimento dos reagentes da combustão do biodiesel de sebo bovino do <i>software CEA NASA</i>	80
Figura 34. Tela de preenchimento dos reagentes da combustão do diesel Jet-A do <i>software CEA NASA</i>	81
Figura 35. Tela preenchimento dados de saída do <i>software CEA NASA</i>	82
Figura 36. Primeira aba de criação de novo projeto do <i>software Diesel-RK</i>	83
Figura 37. Características do motor: ciclo de funcionamento e combustível e método de ignição selecionadas no <i>software Diesel-RK</i>	84
Figura 38. Características do motor: design básico do motor, número de cilindros e sistema de arrefecimento selecionadas no <i>software Diesel-RK</i>	84
Figura 39. Características do motor: diâmetro do cilindro, curso do pistão, velocidade nominal do motor e taxa de compressão selecionadas no <i>software Diesel-RK</i>	85
Figura 40. Parâmetros do ambiente no nível do mar e aplicações do <i>software Diesel-RK</i>	86
Figura 41. Razão de pressão do compressor em função da BMEP.	86
Figura 42. Características do motor: turbo ou superalimentado e inter resfriamento selecionadas no <i>software Diesel-RK</i>	87
Figura 43. Sistema de operação – definição de RPM.	88
Figura 44. Sistema de injeção de combustível – projeto do injetor.	89
Figura 45. Sistema de injeção de combustível – determinação da câmara de combustão.	90
Figura 46. Característica da injeção de combustível para diferentes suprimentos de combustível de 0,068g.	91
Figura 47. Seleção do combustível Diesel nº 2.	92

Figura 48. Seleção do combustível Biodiesel SME B100.....	93
Figura 49. Seleção do combustível Biodiesel SME B20D80 (mistura).	93
Figura 50. Seleção do combustível Biodiesel SME B40D60 (mistura).	94
Figura 51. Iniciar a simulação no <i>software Diesel-RK</i>	94

LISTA DE TABELAS

Tabela 1. Indicadores mundiais de sustentabilidade.	3
Tabela 2. Recursos e reservas energéticas brasileiras.	11
Tabela 3. Limites de flamabilidade dos principais combustíveis em ar.	15
Tabela 4. Comparação entre limites de flamabilidade da mistura de oxigênio puro e ar com alguns combustíveis.	17
Tabela 5. Classificação das fontes de energia.	20
Tabela 6. Propriedades do óleo diesel e biodiesel.	24
Tabela 7. Teor de óleo nas sementes tradicionais e alternativas.	26
Tabela 8. Variáveis e Indicadores deste trabalho.	41
Tabela 9. Propriedades do biodiesel de sebo bovino.	44
Tabela 10. Composição quantitativa do biodiesel de sebo bovino.	44
Tabela 11. Propriedades Termodinâmicas da combustão do Jet-A para ϕ variando de 0,8 a 1,2.	46
Tabela 12. Propriedades Termodinâmicas da combustão do biodiesel para ϕ variando de 0,8 a 1,2.	49
Tabela 13. Parâmetros de eficiência e potência resultantes do <i>software Diesel-RK</i>	55
Tabela 14. Parâmetros de combustão resultantes do <i>software Diesel-RK</i>	57
Tabela 15. Parâmetros ecológicos resultantes do <i>software Diesel-RK</i>	58

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.2. Justificativa.....	5
1.3. Objetivos.....	7
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	9
2.1. Energia.....	9
2.2. Combustão	12
2.3. Regimes de combustão	13
2.4. Limites de flamabilidade	14
2.5. Eficiência da combustão	18
2.6. Sustentabilidade.....	19
2.7. Biodiesel	22
2.8. Motor de ignição por compressão	27
2.8.1. Emissões poluentes resultantes da combustão do biodiesel	31
2.9. <i>Software Chemical Equilibrium with Applications – CEA</i>	32
2.10. <i>Software Diesel-RK</i>	34
2.11. Considerações Finais	36
3. METODOLOGIA.....	37
3.1. Tipos de pesquisa	37
3.2. Materiais e Métodos	39
3.3. Variáveis e Indicadores	40
3.4. Instrumento e Coleta de Dados.....	41
3.5. Tabulação de Dados.....	41
3.6. Considerações Finais do Capítulo	42

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	43
4.1. Propriedades Físicas e Químicas dos Fluidos	43
4.2. Análise da combustão realizada pelo <i>software CEA</i>	45
4.4. Análise do comportamento do motor usando o <i>software Diesel-RK</i>	54
4.4.1. Otimização do tempo de injeção na potência máxima.....	65
4.4.2. Otimização do tempo de injeção de combustível no torque máximo	67
5. CONCLUSÃO.....	70
5.1. Conclusão	70
5.2. Recomendações para trabalhos futuros	71
APÊNDICE 1: TUTORIAL PARA O SOFTWARE CHEMICAL EQUILIBRIUM FOR APPLICATIONS	78
APÊNDICE 2: TUTORIAL PARA O SOFTWARE DIESEL RK.....	83

1. INTRODUÇÃO

Neste primeiro capítulo é apresentada uma abordagem teórica sobre os principais elementos a serem tratados, os quais estão diretamente relacionados com a formulação do problema nessa área, a justificativa acerca da importância dessa pesquisa, a descrição dos objetivos geral e específicos e finalmente, a estrutura em que esse trabalho será apresentado.

1.1. Formulação do Problema

A definição feita por Maxwell em 1872 sobre a energia leva em consideração as mudanças de estado de determinado sistema e a força contrária que resiste a essa mudança. Existem diversas variações dessa definição, em que um potencial energético resulta em um produto, o qual pode ser convertido em outras formas de energia, caracterizando uma das leis fundamentais da natureza, o princípio da conservação de energia (RUDOLF CLAUSIUS, 1850).

De acordo com Lavoisier *apud* Unicamp (2021), a termodinâmica é definida como a ciência da energia, em que a primeira lei elucidada que “na natureza nada se cria, nada se perde, tudo se transforma”. Então, observa-se que dessa forma a transformação de energia em calor pode ser entendida, o que promove o surgimento de máquinas térmicas, como os motores de combustão e as turbinas a gás.

Segundo Goldemberg (1988), devido a Segunda Guerra Mundial, houve um crescimento na indústria aeronáutica, o que juntamente com a grande competição tecnológica, em consequência da Guerra Fria, ocasionou a necessidade de instalações energéticas movidas a gás. Além disso, outro fator de grande influência foi o demasiado aumento populacional e, conseqüentemente, a crescente demanda do consumo energético, o que promoveu pesquisas sobre novos meios de obtenção e por novas fontes de energia.

Entretanto, isso causou um impacto ambiental, afetando o meio ambiente e a saúde humana. Em virtude disso, em 1972 a Organização das Nações Unidas (ONU, 2020) convocou a Conferência das Nações Unidas sobre o Ambiente Humano, determinando princípios que representam um manifesto ambiental e aproveitando este momento, em 1987, foi gerado um relatório inovador que trouxe o conceito de desenvolvimento sustentável. Logo, todas as medidas têm o objetivo de amenizar os danos causados pelas ações humanas, visando conciliar desenvolvimento tecnológico e sustentabilidade.

Como resultado foram feitas diversas avaliações sobre os recursos energéticos visando sua utilização de forma mais consciente nas diversas áreas de pesquisa e fabricação (GOLDEMBERG, 1988).

A palavra sustentabilidade tornou-se de grande importância na atualidade, uma vez que houve uma crescente preocupação com as questões ambientais e com a busca de novas fontes de energia limpa. De acordo com a revista “Economia e Desenvolvimento” (2004), entende-se o desenvolvimento sustentável como aquele em que a qualidade de vida do homem e o respeito da produção dos ecossistemas possuem a mesma relevância.

Embora o progresso tecnológico esteja em constante evolução, assim como as necessidades energéticas do homem, a consciência da gravidade dos problemas ambientais vem mostrando essa incompatibilidade. Logo, tornou-se necessário um desenvolvimento de estudos e de medidas para tentar solucionar a questão, buscando por recursos renováveis para produção de energia de forma eficiente e ecológica (GOLDEMBERG, 1988).

Após a Conferência de Estocolmo em 1972, a Organização das Nações Unidas (ONU, 1987) elaborou o seguinte conceito: "desenvolvimento sustentável é aquele que busca as necessidades presentes sem comprometer a capacidade das gerações futuras de atender suas próprias necessidades”.

Assim, a precisão de conhecimento sobre a parte do estoque de capital natural que já foi perdido, quanto encontra-se disponível hoje e a quantidade em risco de destruição irreversível no futuro é essencial (REVISTA ECONOMIA E DESENVOLVIMENTO, 2004).

Segundo Kanem (2017), é ideal o entendimento entre a população e a mudança climática para a intervenção política na proteção ao meio ambiente e dos direitos das pessoas. As emissões de gases tais como dióxido de carbono e monóxido de carbono foram responsáveis por danos irreversíveis ao meio ambiente e de consequências atuais.

Os indicadores mundiais de sustentabilidade estão mostrados na tabela 1, em que se visualiza as quantidades sustentáveis, o valor esperado para o futuro e quanto seria a redução ideal de estoques disponíveis, degradação e poluição anual.

Tabela 1. Indicadores mundiais de sustentabilidade.

Indicadores	Nível sustentável	Nível esperado em 2040	Redução desejável
Estoque disponível de recursos não renováveis			
Petróleo	Para 50 anos	Exaurido	85%
Gás Natural	Para 50 anos	Exaurido	70%
Carvão	Para 50 anos	Exaurido	20%
Cobre	Para 50 anos	Exaurido	80%
Urânio	Para 50 anos	Depende do uso da energia nuclear	Não é sabido
Alumínio	Para 50 anos	Estoque >50 anos	0
Degradação de recursos renováveis			
Biomassa	20% ter.	50% ter.	60%
Diversidade de espécies	Extinção menos 5 espécies por ano	365-65000 espécies por ano	99%
Poluição (emissões por ano)			
Dióxido de carbono	2,6 Gton	13 Gton	80%
Cádmio	2 ton	50 ton	95%
Cobre	70 ton	830 ton	90%
Chumbo	58 ton	700 ton	90%
Zinco	215 ton	5190 ton	95%
Degradação do solo pela erosão	9,5 bilhões ton	45-60 bilhões ton	95%

Fonte: Weterings e Opschoor, 1992.

Os combustíveis mais usados são também derivados de recursos que estão exauridos até 2040 e a grande necessidade ambiental de redução desses, impulsiona a busca por outros recursos, conforme a tabela 1. Além disso, as quantidades alarmantes de emissões poluentes tornam ainda mais importante a pesquisa por alternativas renováveis.

A preocupação com o meio ambiente é progressiva, uma vez que os efeitos negativos dessa poluição estão se agravando e afetando diretamente a qualidade de vida da população. De acordo com Brito (2018), no Brasil as indústrias liberam 85% das emissões de gases, os quais promovem o efeito estufa.

O foco deve ser nos setores de indústrias de energia intensiva, aprimorando formas de reciclagem e adquirindo equipamentos elétricos mais eficientes. Porém, as principais barreiras estão no setor financeiro, nos recursos técnicos, no retorno de capital e na incorporação de inovações tecnológicas (Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas, 1988).

Segundo o Instituto de Recursos Mundial (*World Resources Institute*, 1982), os setores que aumentam a concentração de gases de efeito estufa (GEE) são os de geração de energia, industrial, transporte e agricultura. Ainda, o uso de combustíveis fósseis, os processos industriais, a disposição inadequada de resíduos sólidos urbanos e os gases liberados também contribuem para o agravamento da poluição.

O Brasil é pioneiro no uso de biocombustíveis, e grande parte da energia (cerca de 45%) e dos combustíveis (cerca de 18%) consumidos são renováveis. Assim como o resto do mundo, o país possui uma busca constante de alternativas de uso consciente para substituição do petróleo, ressaltando a importância de pesquisas sobre a utilização do biometano, biodiesel, bioetanol, entre outros (ANP, 2021).

Os combustíveis e a sua combustão são áreas de estudo fundamentais para o desenvolvimento da ciência e da tecnologia. A grande demanda industrial é suprida pelo crescente fornecimento de energia, obtida através dos combustíveis (HILSDORF, 2004).

Visando a preservação do meio ambiente, a utilização de biocombustíveis tornou-se de suma importância, uma vez que são derivados de biomassa renovável e também um meio adotado para substituir os combustíveis derivados de petróleo e de gás natural. No Brasil, os principais biocombustíveis utilizados são o etanol e o biodiesel, os quais são produzidos através da cana-de-açúcar e de óleos vegetais ou gorduras animais e adicionado ao diesel, sequencialmente (ANP, 2021).

Segundo Bohon (2010), os combustíveis de biodiesel são produzidos através da transesterificação de triglicérides em ésteres metílicos de ácidos graxos (FAME). O processo consiste na reação da matéria prima triglicéridica com um álcool e na catalisação da base, que resultam em subprodutos FAME e glicerol (propano-1,2,3-triol).

O processo de injeção de combustível na câmara de combustão consiste na atomização do combustível de entrada no combustor, o qual é realizado em duas fases. Na primeira fase, as gotas de combustível são quebradas em fragmentos e na segunda fase o restante do fluido é devidamente quebrado. A importância desse processo é a redução das forças internas e externas que atuam sobre o combustível, facilitando a realização da quebra de suas gotas, e como resultado obtêm-se uma combustão mais eficiente (SARAVANAMUTOO *et al.* 2001).

A combustão consiste em reações químicas exotérmicas para oxidação de um combustível, a fim de provocar uma liberação de energia ou poder calorífico. A energia resultante dos combustíveis é conhecida como energia química, a qual é convertida em energia térmica, produzindo gases (NOGUEIRA, 2016).

A câmara de combustão, ou combustor, é o espaço em que ocorre a queima da mistura ar-combustível em um motor, liberando calor e resultando em gás quente com mínima perda de pressão e eficiência máxima (RODRIGUES, 2009).

Vale ressaltar que a disponibilidade e o custo do combustível são fatores de importância na produção para o aproveitamento industrial. Neste sentido, lembrando da necessidade de um substituto natural e renovável do diesel de petróleo, o biodiesel é introduzido e torna-se foco de pesquisas.

Todavia, a avaliação técnica do uso do combustível em um motor de combustão deve ser feita no intuito de avaliar os processos que ocorrem dentro da câmara de combustão e as emissões que são liberadas, logo uma análise teórica e experimental também é importante para compreender os fenômenos e como a implantação de biocombustíveis será essencial para a geração de energia sustentável (KESSLER, 2016).

Portanto, tem-se o seguinte questionamento:

Como avaliar a influência da queima do biodiesel em um motor de combustão interna de ignição espontânea e as suas emissões a partir dos softwares *Chemical Equilibrium with Applications e Diesel-RK?*

1.2. Justificativa

De acordo com a Agência Nacional de Petróleo – ANP (2021), Gás Natural e Biocombustíveis:

O biodiesel é um combustível renovável obtido a partir de um processo químico denominado transesterificação. Por meio desse processo, os triglicerídeos presentes nos óleos e gordura animal reagem com álcool primário, metanol ou etanol, gerando dois produtos: o éster e a glicerina.

Esse biocombustível tem uma grande demanda e juntamente com as especificações das normas, tem o uso crescente no Brasil, elucidado pelo fato da disponibilidade territorial e as condições climáticas favoráveis.

Dos dados estatísticos mostrados pela ANP (2021) observa-se o aumento da produção mensal da utilização de biodiesel como combustível no Brasil de 2005 a 2019, representada pela figura 1.

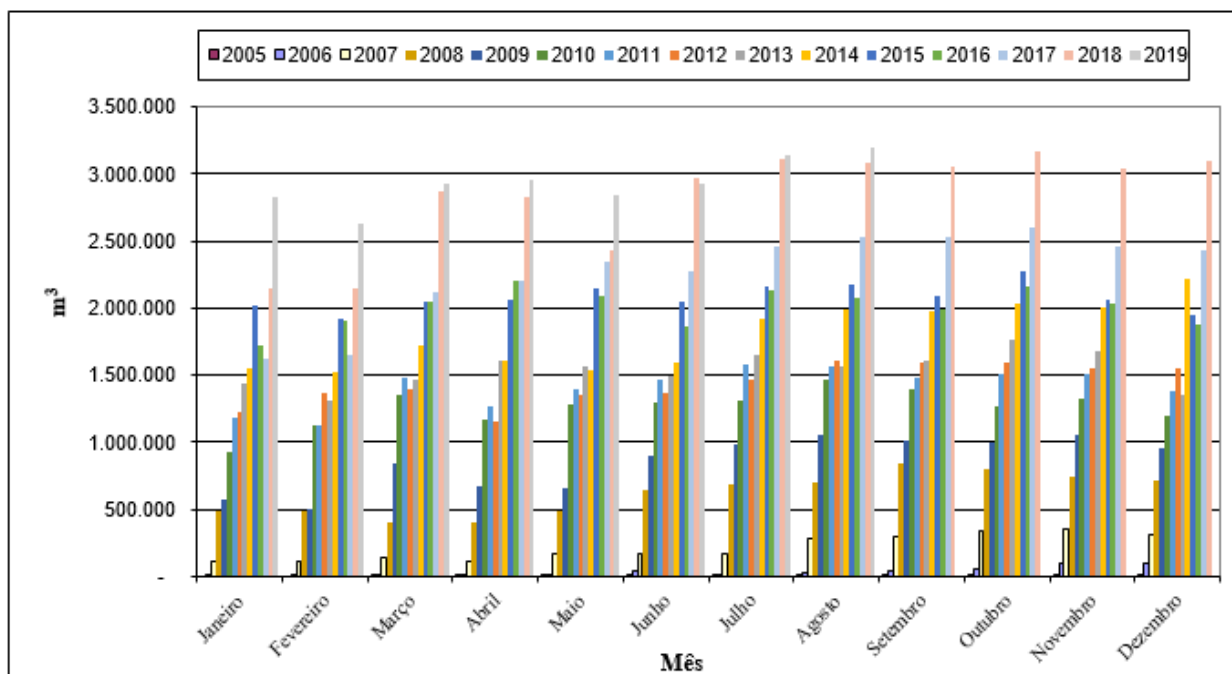


Figura 1. Produção mensal de biodiesel no Brasil.

Fonte: ANP, 2021.

Conforme a figura 1, observa-se que a produção de biodiesel é crescente ao longo dos anos, chegando a mais de três milhões de metros cúbicos em 2018 e 2019. Os meses que apresentam as maiores produções, e conseqüentemente as maiores demandas são julho, agosto e outubro.

O biodiesel é uma fonte alternativa de combustível utilizada em motores de combustão interna de ignição por compressão (ciclo diesel), isto é, o combustível, vaporizado e misturado com ar, realiza combustão através da compressão exercida por um pistão na câmara de combustão (SANTOS, 2008).

No Brasil, o biocombustível deve estar de acordo com a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), para uma produção consciente. A adoção desse, resulta na redução de várias das emissões associadas ao diesel, como o material particulado (MP), monóxido de carbono (CO), hidrocarbonetos (HC), entre outros (NOGUEIRA, 2004).

Então, uma inovação tecnológica com essa solução energética destaca a necessidade de pesquisa nessa área, envolvendo todo um modelo de desenvolvimento social utilizando de uma energia renovável.

Em função disso, o trabalho visa uma análise técnica da utilização do biodiesel para a geração de energia sustentável em motores de combustão interna de ignição espontânea.

1.3. Objetivos

1.3.1. Geral

Avaliar tecnicamente, com o uso de *softwares*, o comportamento do biodiesel em um motor de combustão interna de ignição espontânea, com vistas a geração de energia e sustentabilidade.

1.3.2. Específicos

- Realizar revisão bibliográfica sobre a energia, motores de combustão interna, câmaras de combustão, ciclo diesel e biodiesel;
- Descrever a metodologia adotada, apresentar as variáveis e os indicadores de estudo e demonstrar a instrumentação de coleta e tabulação dos dados obtidos;
- Analisar, por meio do *software Chemical Equilibrium with Applications*, os parâmetros de operação e as frações molares dos produtos de combustão;
- Simular a combustão do biodiesel no motor de ignição por compressão através do *software Diesel-RK*, para otimizar e analisar as emissões e os parâmetros de operação do motor;
- Realizar sugestões de trabalhos futuros.

1.4. Estrutura do Trabalho

A estrutura do trabalho é composta por cinco capítulos, no qual o primeiro consiste na introdução dos temas que serão discutidos na pesquisa e sequencialmente, a formulação do problema, a justificativa da realização do trabalho e os objetivos gerais e específicos.

No segundo capítulo será feita a fundamentação teórica dos conceitos de energia, combustão, sustentabilidade, biodiesel, a avaliação técnica utilizando o *software CEA* e a análise e otimização da combustão pelo *software Diesel-RK*, buscando resultados satisfatórios ao procedimento.

Por conseguinte, o terceiro capítulo elucidada a metodologia utilizada para a simulação computacional da injeção de combustível na câmara de combustão de um motor de ignição por compressão.

O quarto capítulo demonstra os resultados obtidos da avaliação técnica por meio do *software CEA* e a simulação da combustão que ocorre dentro do motor interno por ignição através do *software Diesel-RK*.

Enfim, no quinto capítulo será realizada a conclusão deste trabalho, pontuando os diferentes parâmetros operacionais e sua influência acerca da injeção do biodiesel em uma câmara de combustão de um motor interno de ignição e finalmente, sugerir os assuntos com maior importância para estudos em trabalhos futuros.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo desenvolve-se o tema energia, combustão, sustentabilidade, biodiesel, avaliação técnica no *software Chemical Equilibrium with Applications (CEA NASA)* e simulação da combustão no motor pelo *software Diesel-RK*.

2.1. Energia

Segundo Goldemberg e Lucon (2007), os condicionantes vitais da humanidade são a energia, a água e o ar. Diante do exposto, desde os primórdios da vida humana, a energia teve um fluxo tão necessário e crescente que resultou na necessidade de uma intervenção humana para o seu aumento. Na Idade Média, foram obtidas energias por meio de água e de ventos, mas só posteriormente, quando houve a Revolução Industrial, que foi possível notar o real desenvolvimento a fim de aumentar a demanda, através do uso de outros materiais como carvão, petróleo e gás.

A energia é um dos principais desafios e oportunidades apresentados na atualidade mundial. Visto que é essencial e influencia em diferenciados propósitos, como empregos, segurança, mudanças climáticas, produção de mercadorias ou aumento de renda. Portanto, torna-se importante trabalhar visando aprimorar métodos eficazes de obtenção de energia em conjunto com o desenvolvimento sustentável, com foco em melhorar a eficiência energética e garantir que seja renovável (UNITED NATIONS, 2015).

De acordo com Bucussi (2006), a palavra energia é a tradução do grego *enérgεια*, empregada a fim de explicar diversos fenômenos, sendo entendida, no geral, como trabalho. A partir disso, foram denominadas variadas definições a essa palavra, algumas por cientistas renomados como Galileu Galilei (1564) o qual afirmava ser o ímpeto nos corpos em movimento, Leibniz (1646) e Huygens (1629) que reconhecem durante as colisões uma conservação da *vis viva*, Lagrange (1736) que admite o princípio da conservação de energia, entre outros.

Com base nas contribuições científicas de Galileu e de outros, Newton formulou uma teoria sobre os movimentos dos objetos que possuem uma força aplicada a eles. Através das explicações surge a mecânica clássica usada atualmente, a qual conceitua o trabalho, a energia cinética e potencial, expandindo e complementando o conceito de energia (SHAPIRO *et al.*, 2006).

Como afirma a *Encyclopaedia Britannica* (2019), na física a energia pode existir na forma de potencial, cinética, térmica, elétrica, nuclear e outras. Além disso, a energia está no processo

de transferência de calor de um corpo para outro ou na realização de trabalho. Após ser transferida, a energia é sempre projetada de acordo com sua natureza. Portanto, o calor pode tornar-se energia térmica, enquanto o trabalho associa-se com o movimento, um objeto tensionado pode ser configurado para obter a energia potencial. Da mesma forma, a energia nuclear devido a resultante ser da configuração de partículas subatômicas no núcleo de um átomo, é energia potencial.

Segundo Goldemberg e Lucon (2006), no Brasil entre os anos de 1980 e 2002 houve um aumento de 44,8% da taxa de produção de eletricidade. As principais fontes são os recursos hidráulicos e potencial, mas a inserção de biomassa, energia nuclear e gás natural contribuíram positivamente na diminuição desses meios gravemente poluentes, resultando em uma redução de 9% da hidroeletricidade. Desses dados, a biomassa foi responsável pela demanda de 8% da eletricidade do país.

Além disso, em razão do impacto ambiental, a Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL) ressalta a criação do Programa de Incentivo às Fontes Alternativas (2015) visando o crescimento renovável na produção de energia elétrica, em vigor da Lei nº 10.438/2002.

No que diz respeito ao setor de energia brasileiro, destaca-se a inevitabilidade da redução de importação do petróleo, a fim de diminuir gastos desnecessários. Assim, objetiva-se a autossuficiência, o que, conseqüentemente, aumentaria o fluxo de produtos e serviços para exportação. Todavia, ainda assim, o petróleo é um dos maiores investimentos realizados no país, o qual poderia ser liberado para recursos com maiores e/ou melhores retornos (GOLDEMBERG, 2006).

Alternativas para a substituição de forma sustentável foram foco nesse momento, o que sucedeu no desenvolvimento de meios de utilização da energia de biomassa. Segundo Goldemberg (2006), a sua funcionalidade no Brasil deriva da grande disponibilidade de recursos e mão de obra barata, ligeiro crescimento industrial e urbano, juntamente com o fator histórico do país.

A tabela 2 demonstra os recursos e reservas energéticas brasileiras, realizando comparações entre as fontes de energia do país com relação ao tempo.

Tabela 2. Recursos e reservas energéticas brasileiras.

Fonte	Recursos medidos	Reservas estimadas	Total	Energia	Consumo em 1996	Duração estimada (anos)
Petróleo ($10^3 m^3$)	771150	1073070	1844220	1604000	39400	20
Gás natural ($10^6 m^3$)	157704	197056	354760	344000	5747	30
Hidroeletricidade (GW ano)	92,9	51,8	144,7	236000	77047	25
Álcool ($10^6 m^3$)	12,6	-	12,6	22287	922087	-

Fonte: Goldemberg, 1988.

Como mostra a tabela 2, em razão do grande consumo proveniente da alta demanda de energia, as reservas energéticas estão se esgotando, a previsão de escassez de recursos como petróleo, gás natural e hidroeletricidade já é estimada desde 1998.

Além do mais, a utilização de combustíveis não renováveis, pretendendo suprir a alta demanda energética, causaram danos ambientais sérios e de grandes proporções. Após a Revolução Industrial agravou-se o quadro de destruição da biosfera, em virtude do efeito estufa, da degradação da camada de ozônio, da liberação de gases tóxicos, do aumento da produção e do descarte, proporcionando o acúmulo de substâncias não biodegradáveis, desmatamento, dentre outras consequências (AMARAL, 2010).

Segundo Goldemberg (1998), a demanda e as reservas brasileiras não crescem proporcionalmente, uma vez que os combustíveis fósseis já possuem uma previsão limite de estoque, sendo de 20 a 30 anos. Por esse motivo, o desenvolvimento sustentável adquire força em conjunto com o uso de fontes renováveis de energia.

Logo, foram implantadas políticas que promovem a conservação e geração de energia de forma consciente, como o Programa Nacional de Conservação de Energia Elétrica (Procel) e o Programa Nacional de Racionalização do Uso dos Derivados do Petróleo e do Gás Natural (Conpet). Além de instrumentos legais responsáveis pela criação e fiscalização de leis, as quais estabelecem os limites aceitáveis da exploração sustentável (GOLDEMBERG, 2007).

Como afirma Manahan (1993), por volta de metade da radiação infravermelha retida na atmosfera é resultante da emissão de dióxido de carbono. Porém, a combustão de combustíveis

fósseis, na maioria dos países mais industrializados ou não, ainda permanece como a sua fonte de aproveitamento de energia.

2.2. Combustão

De acordo com Leal (2017), entende-se a combustão como uma reação exotérmica que ocorre entre o combustível e o oxidante, em que há uma perda térmica. Os elementos químicos dos combustíveis são, geralmente, o carbono, o hidrogênio e o enxofre, os quais são causadores dessa liberação de calor. A reação química simples abaixo representa esse processo:



A combustão ou incineração, é um elemento necessário dos resíduos de gestão. Ocasionalmente, para a maioria dos sólidos e diversos líquidos, a incineração apresenta-se apenas como uma etapa de todo um processo (NIESSEN, 2002).

Segundo Lefebvre e Ballal (2010), na câmara de combustão se processa a queima dos elementos químicos e é onde sucede o depósito de energia à mistura ar-combustível. Além disso, também possibilita o controle da emissão de poluentes e a eficiência do processo.

Então, as características ideais dos combustores para que os requisitos sejam cumpridos, são alta eficiência de combustão, ignição confiável e suave, amplos limites de estabilidade, baixa perda de carga, distribuição de temperatura de saída adaptada, baixas emissões de fumaça e gases poluentes, ausência de oscilações de pressão e instabilidade induzida pela combustão, tamanho e formato compatível, baixo custo, fácil manufatura e manutenção, durabilidade e capacidade de mais de um combustível (LEFEBVRE e BALLAL, 2010).

Na figura 2 observa-se a representação do processo de liberação de energia proveniente das reações de combustão.

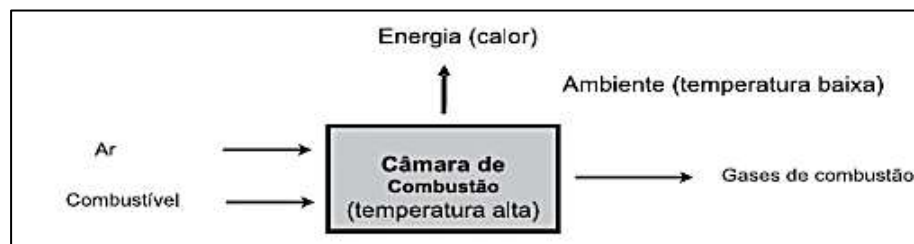


Figura 2. Energia química nas reações de combustão.
Fonte: Nogueira, 2001.

Uma explicação simplificada da figura 2 é que no interior da câmara de combustão a mistura ar-combustível em uma alta temperatura libera energia e gases de combustão.

Com o intuito de realizar a queima de combustíveis líquidos, primeiro deve-se misturar as gotículas de combustível com o ar pela vaporização, na qual ocorre a quebra de hidrocarbonetos e conseqüentemente, a mistura requerida. Nos combustíveis gasosos a metodologia é simplificada e similar na câmara de combustão (BOYCE, 2002).

Para Lefebvre e Ballal (2010), a realização da combustão tem como finalidade o aumento da temperatura do fluxo de ar de queima eficiente de combustível. Porém, para a garantia dessa eficiência devem ser considerados fatores de temperaturas, pressão e fluxo de massa no decorrer do processo.

A reação ideal de combustão, também chamada de combustão completa, é realizada quando todo o carbono, hidrogênio e enxofre são oxidados, respectivamente, para dióxido de carbono (CO_2), água (H_2O) e dióxido de enxofre (SO_2). Além do mais, visando facilitar o cálculo tem-se também que todo o nitrogênio resulte na produção de nitrogênio gasoso (LEAL, 2017).

2.2.1. Regimes de combustão

Conforme Lefebvre e Ballal (2010), existem dois tipos de regimes de combustão:

- Detonação: entende-se como o aparecimento de ondas de choque com velocidades supersônicas para o processo, sendo empregado na injeção de oxigênio, objetivando simplificar a ignição e aceleração do motor;
- Deflagração: entende-se o processo por uma chama que é propagada por entre a mistura não queimada, em que há uma vista frontal de uma interface entre os gases queimados e a mistura sem reação, diferenciando-os pelo primeiro apresentar volume e temperatura mais elevados e densidades menores quando comparados ao segundo. Além disso, ocorre com velocidades inferiores.

Ainda assim, há a afirmação de que a queima ou explosão não acontecem necessariamente em todas as misturas de combustível. A explicação é que a composição da mistura pode ser apropriada a propagação da chama através da mistura de combustível com ar, logo quando quantidades de combustíveis pequenas ou muito grandes forem adicionadas à mistura, essa não inflamará (LEFEBVRE E BALLAL, 2010).

2.2.2. Limites de flamabilidade

Os limites de flamabilidade podem ser definidos como o intervalo de concentração em que a substância inflamável é capaz de produzir fogo ou explosão quando há uma fonte de ignição presente. Isto é, a mistura ar-combustível só será inflamável quando sua composição se encontra dentro de um intervalo de flamabilidade (ZHAO, 2008).

De acordo com Glassman (2008), os limites de flamabilidade são definidos pela concentração mais pobre e mais rica que realiza a auto sustentação da chama. Esses sofrem influências da taxa de geração de calor, dependente da taxa de reação e do calor da reação à mistura e a taxa de perda de calor da chama.

A regra utilizada para ponderar os limites de flamabilidade consiste que o limite superior é da ordem de três vezes a quantidade estequiométrica e o limite inferior é da ordem de 50% desse valor estequiométrico, mas existem exceções (GLASSMAN, 2001).

Em vista disso, segundo Zhao (2008), os limites de flamabilidade foram divididos em dois tipos: o Limite Superior de Flamabilidade (LSF), em que a concentração de combustível é mais rica e há a deficiência de oxigênio para a queima e o Limite Inferior de Flamabilidade (LIF), cuja concentração de combustível se torna muito baixa para ser inflamada e com uma maior quantidade de oxigênio. A tabela 3 mostra alguns valores de Limite Inferior e Superior de Flamabilidade (LIF e LSF) e o percentual estequiométrico (PE) para os principais combustíveis em ar.

Tabela 3. Limites de flamabilidade dos principais combustíveis em ar.

Composto	Fórmula	LIF [%v]	LSF [%v]	PE [%v]
Monóxido de Carbono	CO	12,50	74,20	29,58
Hidrogênio	H ₂	4,00	75,00	29,58
Metano	CH ₄	5,00	15,00	9,50
Etano	C ₂ H ₆	3,00	12,40	5,66
Etileno	C ₂ H ₄	3,10	32,00	6,54
Acetileno	C ₂ H ₂	2,50	80,00	7,75
Propano	C ₃ H ₈	2,10	9,50	4,03
Propileno	C ₃ H ₆	2,40	11,00	4,46
n-Butano	C ₄ H ₁₀	1,60	8,40	3,13
iso-Butano	C ₄ H ₁₀	1,60	8,40	3,13
n-Pentano	C ₅ H ₁₂	1,40	7,80	2,56
iso-Pentano	C ₅ H ₁₂	1,40	8,30	2,56
n-Hexano	C ₆ H ₁₄	1,25	6,90	2,16
n-Heptano	C ₇ H ₁₆	1,00	6,00	1,87

Fonte: GasNet *apud* Leal, 2017.

Observa-se na tabela 3, que o monóxido de carbono e o hidrogênio possuem os maiores intervalos de limites de flamabilidade, o que é a causa de um efeito positivo na reação da mistura gasosa ar-combustível durante a combustão, já que a queima ocorre dentro desses limites.

Vale esclarecer que quando se submete a mistura comburentes à ignição, o resultado é a formação de uma chama e daí entende-se que a reação ocorre dentro do intervalo de ignição (IIG). Então, existem limites inferiores e superiores de ignição, determinados pelo ponto de fulgor (VIDAL *et al.*, 2004).

Porém, devido aos propósitos de segurança dos processos, evitando sempre explosões com riscos e incêndios, torna-se mais importante a avaliação da capacidade de propagação da chama do que da sua capacidade de iniciação (COWARD e JONES, 1952).

Na figura 3 tem-se um gráfico da velocidade de propagação da chama para diversos gases em relação à proporção de ar primário de combustão.

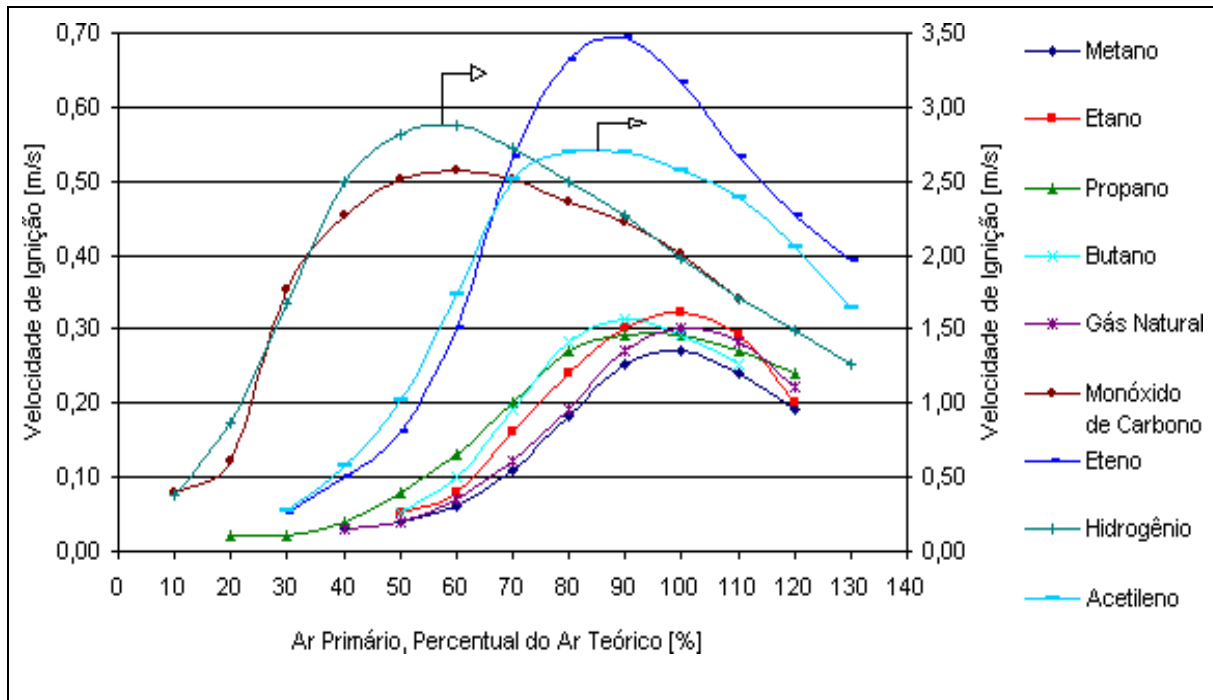


Figura 3. Velocidade de ignição em relação ao percentual do ar teórico
 Fonte: Gas Engineers Handbook / SINDE, 1996.

Como indicado na figura 3, o gás metano apresenta a maior velocidade de ignição em função do percentual do ar teórico, seguido pelo hidrogênio e butano. Enquanto a menor é a do eteno, também representado pela cor azul no gráfico.

Um fator importante é a mínima energia de ignição (MEI), ou seja, a mistura comburente demanda uma quantidade de energia maior ou igual a MEI para que ocorra a combustão. Essa propriedade atua sobre os limites de flamabilidade, principalmente em relação ao tipo de combustível, temperatura e pressão (STREHLOW, 1985).

A temperatura influencia diretamente nos limites superior e inferior de flamabilidade em determinada concentração de combustível, podendo até resultar em uma autoignição. Além disso, permite observar quais são as reações com as melhores opções de combustíveis para a combustão em um motor.

Para Zabetakis (1965), considerando a temperatura ambiente T_1 de 25°C, então pode se obter o LSF, avaliado outra temperatura T_2 , de acordo com:

$$\frac{LSF_{T_2}}{LSF_{298,15 K}} = 1 - 0,000784(T_2 - 298,15) \quad (2)$$

O mesmo ocorre quando para LIF, mas com o aumento da temperatura, logo:

$$\frac{LIF_{T_2}}{LIF_{298,15\text{ K}}} = 1 + 0,000721(T_2 - 298,15) \quad (3)$$

Além da temperatura, o outro fator determinante que afeta diretamente esses limites é a pressão inicial. Quanto maior a pressão absoluta inicial maior é o limite superior de flamabilidade, e esse com uma pressão próxima de zero ainda é maior que 10%.

Aumentar as pressões iniciais dos sistemas de gás-combustível, geralmente, podem ampliar sua faixa de limites de flamabilidade, reduzindo o LIF e aumentando o LSF. Essas relações são dadas por (BAKRAUSKAS, 2003):

$$LIF_p = LIF_{(1atm)} - 0,31 \ln P \quad (4)$$

$$LSF_p = LSF_{(1atm)} + 8,9 \ln P \quad (5)$$

Para mais, se a temperatura da chama for entendida como constante nos limites de flamabilidade, o LSF irá aumentar com o aumento de pressão e o LIF não mudará. Exemplos dos limites de flamabilidade de alguns combustíveis quando misturados a oxigênio puro e ao ar estão dispostos na tabela 4.

Tabela 4. Comparação entre limites de flamabilidade da mistura de oxigênio puro e ar com alguns combustíveis.

Combustível	LIF (%)		LSF (%)	
	Ar	Oxigênio	Ar	Oxigênio
H ₂	4	4	75	94
CO	12	16	74	94
NH ₃	15	15	28	79
CH ₄	5	5	15	61

Fonte: Glassman, 1996.

Conforme a tabela 4, a mistura de combustíveis com ar e oxigênio (como oxidantes) apresenta um maior aumento no limite superior de flamabilidade do que no limite inferior, devido a temperatura inicial, o que influencia diretamente na eficiência da combustão.

2.2.3. Eficiência da combustão

A combustão deve ser impreterivelmente eficiente, uma vez que sua ineficiência, além de representar um desperdício de combustível, causa aumento das emissões de poluentes na atmosfera. As consequências da incapacidade de bons resultados de combustão estão diretamente ligadas a fatores ambientais, liberando hidrocarbonetos não queimados e monóxido de carbono, por exemplo (LEFEBVRE E BALLAL, 2010).

Outro fator de grande importância para a combustão é o tempo. Esse é aplicado as mais diversas formas de combustão, como a de combustíveis líquidos ou gasosos, misturados na evaporação, na quebra e na reação química. Portanto, como o tempo disponível para a combustão e a vazão mássica de ar são inversos, a eficiência da combustão é expressa por (LEFEBVRE E BALLAL, 2010):

$$\eta_{comb} = \frac{\Delta h_{real}}{\Delta h_{teórico}} = \frac{[(\dot{m}_{ox} + \dot{m}_{comb})h_3 - \dot{m}_{ox}h_2]}{\dot{m}_{comb}PCI} \quad (6)$$

Em que: η_{comb} é a eficiência de combustão; \dot{m}_{ox} é a vazão mássica do oxidante; \dot{m}_{comb} é a vazão mássica do combustível; h_3 é a entalpia do gás na saída do combustor; h_2 é a entalpia do gás na entrada do combustor e PCI é o poder calorífico do combustível.

Ainda em acordo com Lefebvre e Ballal (2010), a combustão turbulenta consiste na mistura mais eficaz do ar-combustível e na sua constante realimentação, em razão da instabilidade gerada pelo calor liberado. Logo, é utilizado para o aumento da eficiência da combustão e consequentemente em sistemas industriais, promovendo também a redução da emissão de poluentes e do consumo de combustível.

Considerando o meio ambiente, o dióxido de carbono liberado contribui para um dos problemas mais sérios atuais, o aquecimento global, pois esse é um dos gases que absorvem a radiação infravermelha do sol, então permite a penetração dessa radiação solar na superfície terrestre (LEAL, 2017).

2.3. Sustentabilidade

Diferentemente das matrizes energéticas de outros países, a brasileira tem como característica uma elevada utilização de fontes de energia renovável, sendo 44% do total de uso do país. Dentre as fontes renováveis destacam-se a cana de açúcar, hidráulica e a lenha, 15,7%, 14,7% e 9,7%, respectivamente (EPE, 2012).

A figura 4 relaciona a energia total per capita com o passar do tempo e o consumo diário per capita de cada fator.

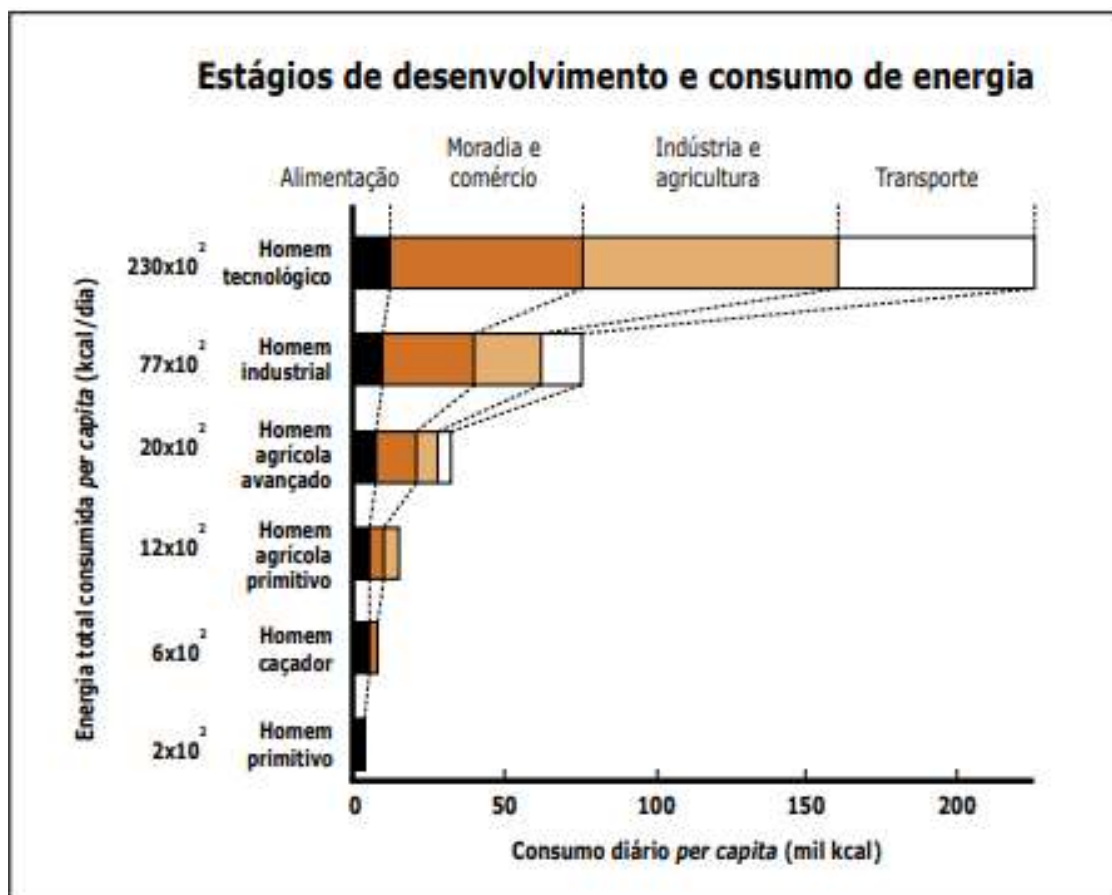


Figura 4. Estágios de desenvolvimento e sua relação com o consumo diário de energia.
Fonte: Revista USP, 2006-2007.

Nessa comparação feita pela revista USP (2006-2007) na figura 4, percebe-se o crescimento no consumo da indústria, agricultura e principalmente, o transporte, que é também um dos responsáveis pela maior parte da emissão de gases poluentes e prejudiciais à natureza.

As fontes de energia fóssil e nuclear demandam determinado tempo para que ocorra sua reposição, sendo assim consideradas não renováveis. Por outro lado, as fontes renováveis caracterizam-se como aquelas que a energia é repostada da natureza, como os potenciais hidráulicos,

eólicos, energia das marés e ondas, radiação solar, geotermal, entre outros. Outra importante fonte renovável é a biomassa, a qual possui divisões das mais tradicionais às mais modernas, por exemplo a lenha e o etanol para automóveis (GOLDEMBERG, 2006)

A tabela 5 mostra as fontes de energia primária e secundária e a classificação como renováveis e não renováveis.

Tabela 5. Classificação das fontes de energia.

Fontes		Energia Primária	Energia Secundária	
Não-renováveis	Fósseis	Carvão mineral	Termoeletricidade, calor, combustível para transporte	
		Petróleo e derivados		
	Nuclear	Gás natural Materiais fósseis	Termoeletricidade, calor	
Renováveis	“Tradicionais”	Biomassa primitiva: lenha de desmatamento	Calor	
	“Convencionais”	Potenciais hidráulicos de médio e grande porte	Hidroeletricidade	
	“Novas”	Outros	Biomassa “moderna”: lenha, replantada, culturas energéticas (cana-de-açúcar, óleos vegetais)	Biocombustíveis (etanol, biodiesel), termoeletricidade, calor
			Energia solar	Calor, eletricidade fotovoltaica
			Geotermal	Calor e eletricidade
Eólica			Eletricidade	
Maremotriz e das ondas	Eletricidade			

Fonte: Revista USP, 2006-2007.

De acordo com a tabela 5, existe uma grande variedade de fontes de energia renovável, além das tradicionais e convencionais já conhecidas, estão surgindo cada vez mais pesquisas sobre os novos recursos, por conseguinte os fósseis e a energia nuclear vão se tornando menos importantes, e então reforçando os benefícios da utilização de biocombustíveis como primeira opção.

Com o propósito de reduzir o uso de combustíveis fósseis foram criados diversos programas, como o Programa Nacional de Alcool (ProAlcool, 1975), Programa Nacional de Conservação de Energia Elétrica (Procel, 1985), Programa Nacional de Racionalização do Uso de Derivados de Petróleo e Gás Natural (Conpet, 1991), Programa Nacional de Produção e Uso de

Biodiesel (PNPB, 2003), Programa de Incentivo às Fontes Alternativas de Energia Elétrica (Proinfa, 2004).

Segundo Goldemberg (2007), uma característica da matriz energética brasileira é sua base hidráulica. Porém, quando comparado à média mundial, há um déficit no estímulo de uso de fontes “modernas” de energias renováveis.

Das energias fósseis até 2001, foram consumidas 80% de seu total, em que 35% corresponde a utilização de petróleo, 23% de carvão e 22% de gás natural, das fontes não renováveis, a energia nuclear utilizada foi de 7% e das renováveis, os 13% restantes. Contudo, apenas 9% do total mundial representam a biomassa tradicional, como a lenha queimada e os outros 4% restantes condiz com o uso direcionado a energia hidrelétrica e 2% direcionados às fontes "modernas" (GOLDEMBERG, 2006).

Para Goldemberg (2006), os principais problemas relacionados às reservas energéticas dos países são os limites das reservas disponíveis, os impactos ambientais, os conflitos regionais, por exemplo as disputas pelo petróleo e o uso da tecnologia nuclear para fins não-pacíficos, e também as pressões na dívida externa dos países em desenvolvimento que tem como um de seus motivos a importação de derivados de petróleo.

Entretanto, o principal foco atualmente tem sido nas mudanças climáticas resultantes do aumento das emissões de dióxido de carbono, metano e outras substâncias naturais ou antropogênicas, atuando diretamente no agravamento do efeito estufa. Nota-se que o cumprimento da produção na demanda energética mundial é o fator de maior relevância nessa forma de poluição, através de termelétricas, transporte, aquecimento de ambientes, entre outros (LUCON, 2006).

A autossuficiência na produção energética sempre foi um dos objetivos do país, sendo realizado através da exploração dos recursos nas profundidades da plataforma continental brasileira, com o intuito de promover a redução de gastos com a importação de petróleo no país (GOLDEMBERG, 2006). Em grande parte essa demanda é suprida pela produção interna de petróleo, tendo como principal empresa a Petrobras.

Sabe-se que grande parte do investimento nacional é feito em petróleo e caso houvesse uma redução nesse, o investimento em outros recursos economicamente mais produtivos promoveriam produtos e serviços para a exportação. Contudo, a relação entre as reservas provadas e a produção atual tem como previsão apenas 20 anos (GOLDEMBERG, 2006).

Na área energética, os principais destaques de acordo com o PNMC, são aqueles que possuem em sua matriz elétrica uma elevada cota de uso de combustíveis renováveis e também o desenvolvimento sustentável através da utilização de biocombustíveis nos meios de transporte

nacionais. Com isso, o incentivo e desenvolvimento político do uso de biocombustíveis deve ser estimulado nas diversas regiões do Brasil (SANTOS, 2012).

Considerando os impactos ambientais, destacam-se a produção e o consumo de energia, porém é necessário e possível a promoção de uma melhoria desses padrões. Dentre eles, o estímulo ao uso mais eficiente de energia e a utilização de fontes renováveis ao invés de fontes fósseis (GOLDEMBERG, 2006).

2.4. Biodiesel

Segundo a revista virtual de química (2011), no século XX agravaram-se os problemas no abastecimento de petróleo devido a questões políticas dos maiores exportadores mundiais da época, o Oriente Médio, ao aumento de preços e por causarem impactos ambientais graves. Por consequência, foi notável o crescimento do interesse por fontes de energia alternativas, uma vez que diversificar a matriz energética tornou-se imprescindível e uma solução encontrada foram os biocombustíveis derivados de óleos vegetais e gorduras animais.

O uso de óleo vegetal como combustível foi um fator de grande importância no desenvolvimento do motor de ignição por compressão, como afirmava Rudolph Diesel. Logo, ele introduziu uma inovação tecnológica, na qual uma fonte térmica produz energia mecânica em um processo a pressão constante, permitindo maior eficiência aos motores a vapor (SERRANO, 2012).

Porém, o petróleo tornou-se foco de investimento por ter um preço baixo e pela facilidade da obtenção de gasolina. Além disso, também surgiram os motores de ignição por faísca, tomando frente do mercado e nos aprofundamentos sobre. Nos anos 80, houve um retorno no desenvolvimento e pesquisa de soluções alternativas ao petróleo, explicado pelo aumento de preços, os problemas futuros de escassez do recurso e a necessidade de redução das emissões (SERRANO, 2012).

A saída ideal é a substituição do combustível fóssil por um combustível limpo, no caso o biocombustível que possui equilíbrio entre as taxas de emissão e consumo de CO₂ resultantes da combustão e da fotossíntese da planta que origina a sua matéria prima, representada na figura 5.

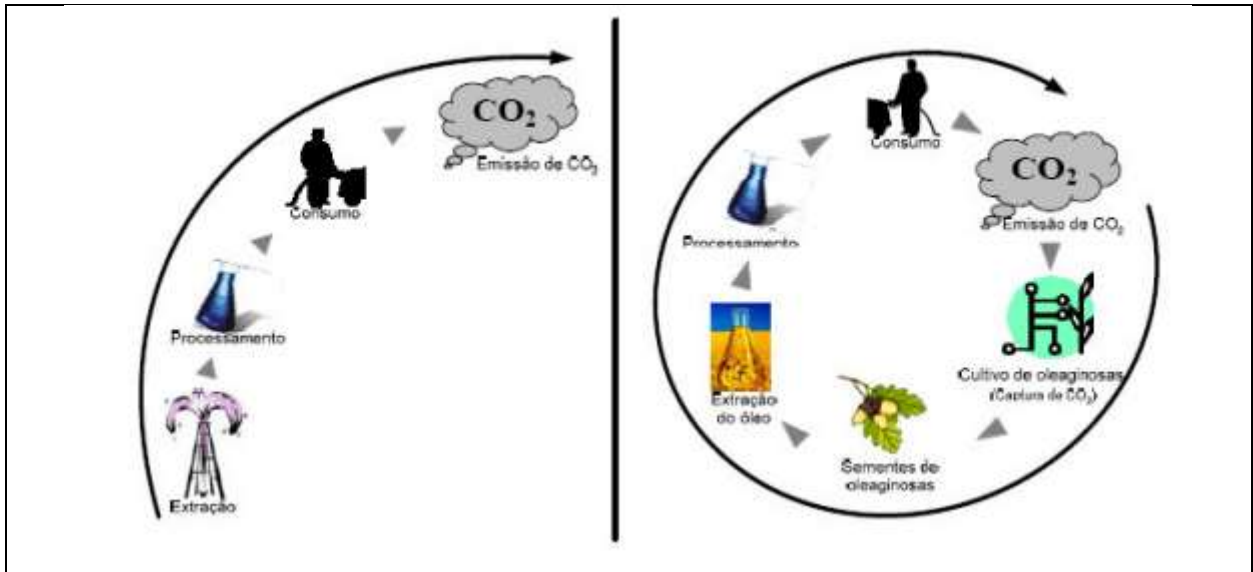


Figura 5. Ciclo aberto do carbono do diesel e ciclo fechado do carbono do biodiesel.
Fonte: Gama, 2008.

Observa-se na figura 5, o detalhamento da ocorrência de um ciclo aberto de carbono do diesel, já que a liberação de CO₂ permanece no ambiente e de um ciclo fechado de carbono, nele ocorre uma captura dessa emissão, a qual irá contribuir na formação das sementes usadas na produção do biodiesel.

Portanto, o biodiesel é uma alternativa plausível de redução do impacto do efeito estufa e quando comparada ao diesel possui diversas vantagens, como maior biodegradabilidade, redução da emissão de gases, maior poder lubrificante, maior ponto de fulgor, entre outros (VIVAS, 2010).

Além disso, as semelhanças fluido e termodinâmicas também tornam equivalentes o desempenho e consumo, e exigem apenas pequenas transformações nos motores, evidenciando a adaptabilidade aos motores do ciclo diesel (GAMA, 2008). A tabela 6 compara as propriedades do óleo diesel e do biodiesel.

Tabela 6. Propriedades do óleo diesel e biodiesel de óleo residual.

Propriedade	Diesel	Biodiesel	Referência
Poder calorífico inferior (kJ/kg)	45000	39600	Kwachareon et al. (2007)
	46173	40606	Lin (2006)
Massa específica (kg/litro)	0,8354	0,8786	Kwachareon et al. (2007)
Índice de cetano	47,64	55,4	Kwachareon et al. (2007)
	50,9	45,8	Lin (2006)
	--	49,2 a 50,4	Rashi e Anwar (2008)
Temperatura de destilação (°C)	Até 350	-	Vlassov (2001)
Ponto de fulgor (°C)	69	122	Kwachareon et al. (2007)
	65	129,1	Lin (2006)

Fonte: Vivas, 2010.

Nota-se na tabela 6 que o biodiesel de óleo residual apresenta maior densidade, índice de cetano e ponto de fulgor, portanto, melhores propriedades e conclui-se que apresenta condições superiores a combustão quando comparada ao diesel, o qual possui a vantagem de maior poder calorífico.

Para Dib (2010), propriedades físicas do biodiesel que devem ser destacadas são:

- Viscosidade e densidade: as quais influenciam no funcionamento de motores de injeção por compressão, logo na circulação e na injeção de combustível;
- Lubricidade: é a medida do poder de lubrificação de uma substância, principalmente da viscosidade e da tensão superficial;
- Ponto de Névoa e de Fluidez: é a temperatura que o líquido começa a ficar turvo por refrigeração e a temperatura em que o líquido não escoar mais livremente, respectivamente;
- Ponto de Fulgor: é a temperatura que um líquido se torna inflamável em presença de chama ou faísca; no caso do biodiesel, quando isento de metanol ou etanol, é superior à temperatura ambiente, portanto, o combustível não é inflamável em condições normais;
- Poder Calorífico: indica a quantidade de energia gerada pelo combustível por unidade de massa quando queimado; o biodiesel possui um consumo semelhante ao diesel mineral;
- Índice de Cetano: quanto maior for em um combustível, melhor a combustão desse em um motor diesel; o índice médio do biodiesel de sebo bovino é 60 e apresenta uma ignição mais controlada e melhor queima no motor quando comparada ao óleo diesel mineral.

Ainda de acordo com Dib (2010), as principais propriedades químicas do biodiesel são:

- Teor de Enxofre: o biodiesel apresenta uma mínima fração molar de enxofre, logo pode ser considerado um combustível limpo; enquanto o diesel mineral o possui e é bastante danoso ao meio ambiente, ao homem e ao motor;
- Teor de Óxidos Nítricos (NOx): as emissões de NOx do biodiesel são dependentes da sua matéria prima ou a formulação da sua produção; quando comparado ao diesel convencional, o biodiesel mostra um aumento dessas emissões;
- Poder de Solvência: o biodiesel solubiliza uma grande variedade de substâncias orgânicas, por isso os cuidados especiais são essenciais;
- Biodegradabilidade e Toxicidade: esse fluido se mostra muito biodegradável e pouco tóxico;
- Estabilidade Oxidativa: o biocombustível quando exposto ao ar mostra possibilidades de oxidação devido as ligações insaturadas das cadeias carbônicas provenientes dos ácidos graxos, mas pode ser revertida com o uso de aditivos.

O biodiesel pode ser produzido através de fontes renováveis como óleos vegetais e gorduras animais. Quimicamente, é denominado como éster monoalquílico de ácidos graxos derivados de lipídeos de ocorrência natural e umas das formas de obtenção mais comuns é pela reação de transesterificação de óleos vegetais e/ou gorduras animais, representado pela figura abaixo (REVISTA BIOTECNOLOGIA CIÊNCIA E DESENVOLVIMENTO, 2003).

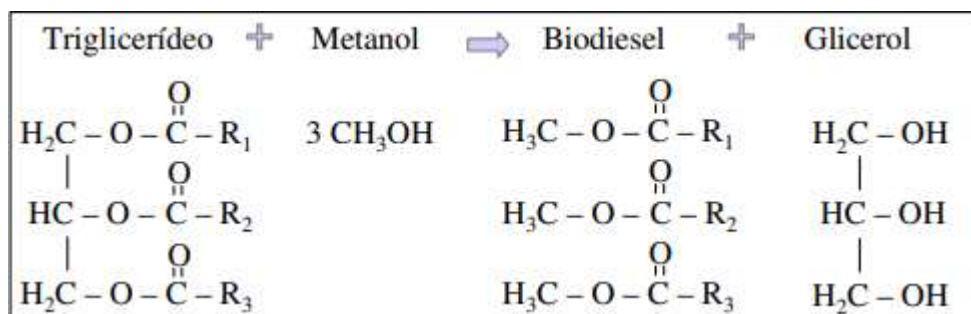


Figura 6. Reação de transesterificação de óleos vegetais e/ou gorduras animais.
Fonte: Gama, 2008.

Como mostra a figura 6, a reação de transesterificação consiste, de forma simplificada, em um triglicerídeo, como a soja e a mamona, reagindo com álcool ou metanol na presença de um catalisador, e como produto tem-se o biodiesel e o glicerol.

De acordo com Gama (2008), a produção de biodiesel através da transesterificação envolve etapas de:

- Preparação da matéria prima: os óleos devem ser processados com baixo teor de ácidos graxos livres e umidade;

- Reação de transesterificação: o triglicerídeo reage com um álcool simples (metanol ou etanol) e forma ésteres metílicos ou etílicos; a adição de excesso de álcool é realizada para separar o glicerol e deslocar o equilíbrio, a fim de obter máximo rendimento de biodiesel;
- Recuperação e desidratação do álcool: recupera-se o álcool dos produtos formados para a sua reutilização no processo;
- Purificação dos ésteres: deve-se lavar e desumidificar o biodiesel para retirar contaminantes, purificando-os.

O biocombustível é mais comumente obtido através do óleo de soja e girassol, porém possui diversas opções de matérias primas a serem estudadas e aprimoradas, como o derivado da palma ou da canola, conforme a tabela 7.

Tabela 7. Teor de óleo nas sementes tradicionais e alternativas.

	Semente	Teor em óleo % (g óleo/g semente)
Matérias primas tradicionais	Girassol	38 - 48
	Soja	~20
	Colza	37 - 50
	Palma	~50
	Jatropha	35 - 40
Novas alternativas de matérias primas	Cártamo	20 - 45
	Mamona	35 - 55
	Cardo	20 - 24
	Microalgas	>50

Fonte: Aveiro, 2011.

Na tabela 7 têm-se que os teores de óleo mais altos obtidos são maiores que 50%, sendo mamona, microalgas, palma e colza, respectivamente. As duas primeiras sementes, destacadas em azul, são novas alternativas de matéria prima enquanto as outras já são tradicionais, por consequência, características mais conhecidas e utilizadas.

Lembrando que as propriedades do biodiesel dependem fortemente da matéria prima usada e de exigências do processo. Por conseguinte, a fim de complementar, é feita uma comparação entre as propriedades do biodiesel e do gásóleo que mostram diferentes efeitos na combustão que acontece dentro do motor, conforme a figura 7.

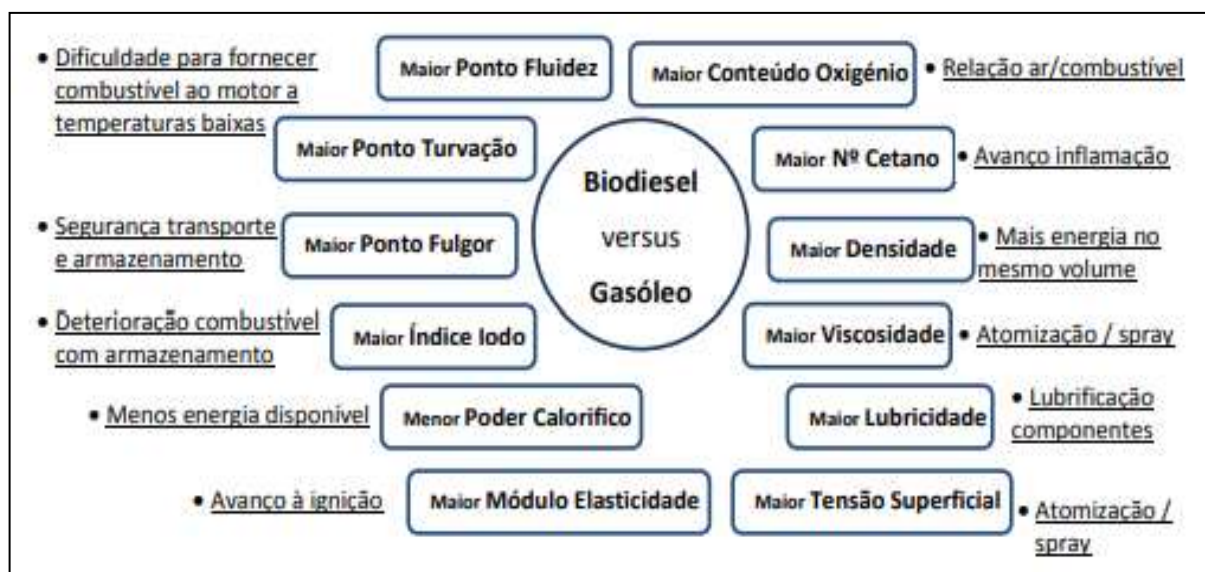


Figura 7. Esquema de comparação das propriedades dos combustíveis com os possíveis efeitos no motor. Fonte: Serrano, 2012.

Como é visto na figura 7, a maioria das características durante a combustão no motor é em favor do biodiesel, como maior número de cetano, maior densidade, mais viscosidade, maior lubricidade, maior tensão superficial, maior módulo de elasticidade e maior ponto fulgor. Porém, há algumas perdas para o gasóleo, como a dificuldade de fornecer ao motor o combustível em baixas temperaturas, menos energia disponível e deterioração do combustível em armazenamento.

2.5. Motor de ignição por compressão

Os motores de combustão interna podem ser classificados pelo seu tipo de funcionamento, o ciclo Otto e o ciclo Diesel, descritos por Nikolaus A. Otto e Rudolf Diesel, respectivamente (VARELLA, 2014).

A combustão dentro desses motores é complexa, uma vez que se caracteriza como um processo tridimensional, transiente, em um meio heterogêneo, constituído pela mistura ar-combustível, e conseqüentemente turbulento (HEYWOOD, 1988).

O motor de combustão interna é dependente do processo de combustão e da quantidade de combustível, e isto posto, influencia também nas suas emissões e no seu desempenho (FERGUSON E KIRKPATRICK, 2001).

A invenção do motor de ignição por compressão foi realizada, além de outros fatores, em função das propriedades do combustível que é utilizado, o qual pode induzir um bom funcionamento e rendimento do motor. O comportamento dos motores de combustão interna é

influenciado pelos diferentes tamanhos e graus de saturação das moléculas nos combustíveis obtidos através de diferentes matérias primas (SERRANO, 2012).

De acordo com Serrano (2012), no motor de ignição por compressão, a combustão comumente ocorre em três fases. A primeira fase é caracterizada pela injeção de gotas de combustível, as quais evaporam e misturam com o ar até que ocorra a ignição, que depende do número de cetano e da temperatura de autoignição do combustível. A segunda fase consiste na combustão da pré-mistura, a continuação da injeção do restante do combustível com a mistura, e logo apresenta uma combustão mais rápida e violenta, com maior pressão e liberação de energia. A terceira fase, chamada de difusa, apresenta uma combustão mais controlada, dependente de uma caudal de combustível injetado, que devido a chama, a maior pressão e a temperatura, reage com o ar com mais facilidade. A representação do primeiro e segundo tempo do motor do ciclo a Diesel é mostrada na figura 8.

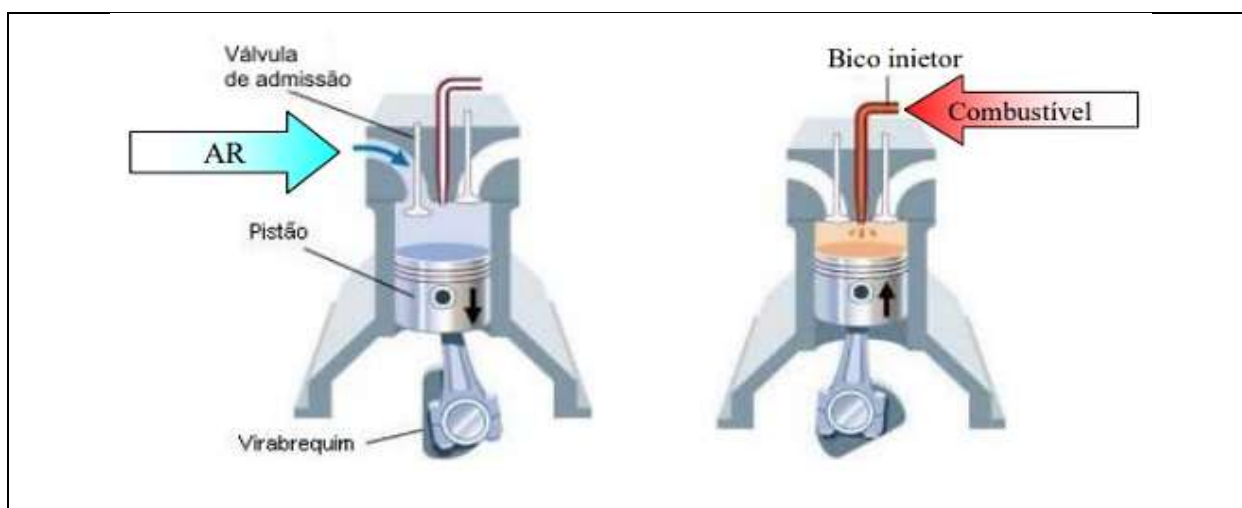


Figura 8. Representação do primeiro e segundo tempo do motor do ciclo diesel.
Fonte: Varella, 2014.

Para Varella (2014), representado pela figura 8, o primeiro tempo é a admissão no cilindro de ar, em sequência, no segundo tempo, o pistão se desloca do ponto morto inferior (PMI) para o ponto morto superior (PMS), resultando na compressão do ar seguida pela elevação da temperatura. Então, o combustível é injetado na câmara de combustão e causa a ignição, explicada pelo contato com o ar aquecido, assim iniciando a combustão. A figura 9 mostra a representação do terceiro e quarto tempo do motor no ciclo Diesel.

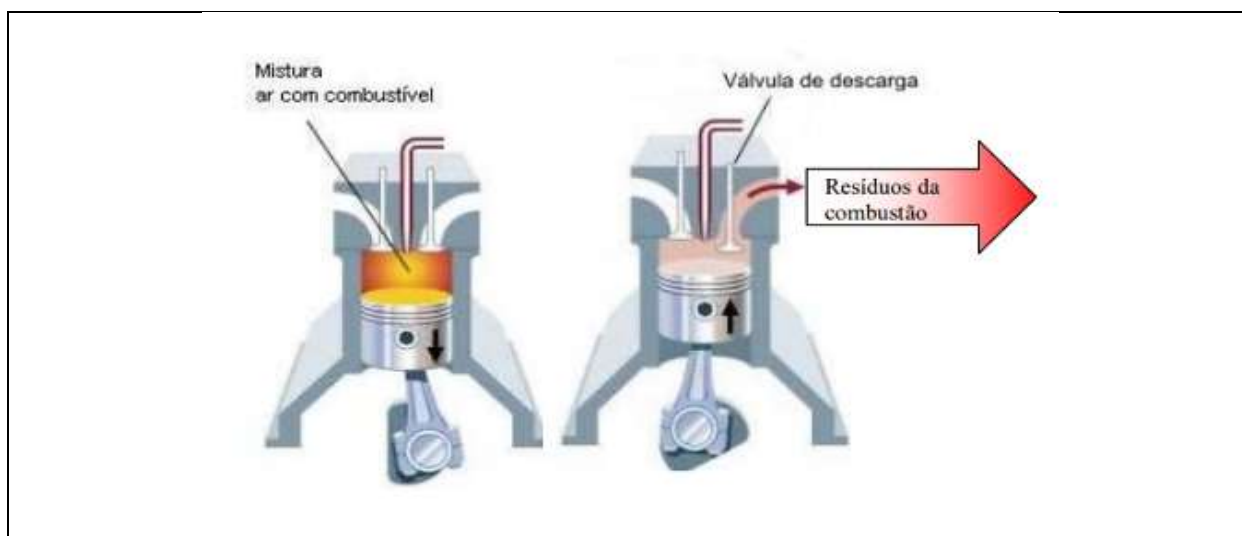


Figura 9. Representação do terceiro e quarto tempo do motor do ciclo diesel.
Fonte: Varella, 2014.

Em sequência, conforme a figura 9, no terceiro tempo, o pistão se desloca do PMS ao PMI e com a injeção do combustível vai inflamando e aumentando a temperatura dos gases. Em razão da expansão, o pistão é acionado transformando a energia térmica em mecânica. A força resultante da expansão dos gases é transmitida para o virabrequim pela biela, causando o movimento de rotação do motor. Por último ocorre a descarga, nela o pistão se desloca do PMI ao PMS ocasionando a eliminação de resíduos da combustão (VARELLA, 2014).

Para Neto (2017), a caracterização do motor pode ser realizada através de parâmetros como:

- Razão de compressão: consiste na relação entre o volume da câmara de combustão com o pistão no PMI e no PMS;
- Volume do cilindro;
- Torque: é uma grandeza vetorial dada pelo componente perpendicular ao eixo de rotação da força aplicada sobre o objeto, causando seu giro; nos motores é medido por um dinamômetro conectado ao volante;
- Potência efetiva: entende-se como a potência após todas as perdas do motor;
- Pressão média efetiva: é a relação entre o trabalho gerado por um ciclo pelo volume deslocado; parâmetro de comparação do desempenho de dois motores distintos.

Então, após introduzir o funcionamento e os parâmetros dos motores ao assunto é necessário retornar no questionamento sobre as emissões poluentes provenientes desses. Mundialmente, um dos fatores de impacto ambiental mais agravante é o de gases de escapamento (BRASIL, 1986).

As emissões de motores a diesel estão diretamente relacionadas à quantidade de enxofre presente no combustível. Como já é de conhecimento, o biodiesel é praticamente livre de enxofre,

uma vez que sua espécie química apresenta valores mínimos, portanto é mais limpo (JULIATO, 2006).

Outro fator sobre o biocombustível acima é a redução da emissão de poluentes para a atmosfera e a sua própria transformação em combustível, o que minimiza seu efeito sobre o solo e os cursos de água (LOPES, 2004).

A definição simplificada de biocombustíveis é todo combustível vindo de matéria prima renovável. Assim, se deduz que esses possuem um balanço neutro de carbono, o que ainda é um assunto de grande discussão (MOTA E MONTEIRO, 2013).

Um gráfico pode exemplificar melhor essa teoria sobre a redução de emissões que agridem a atmosfera, representado pela figura 10.

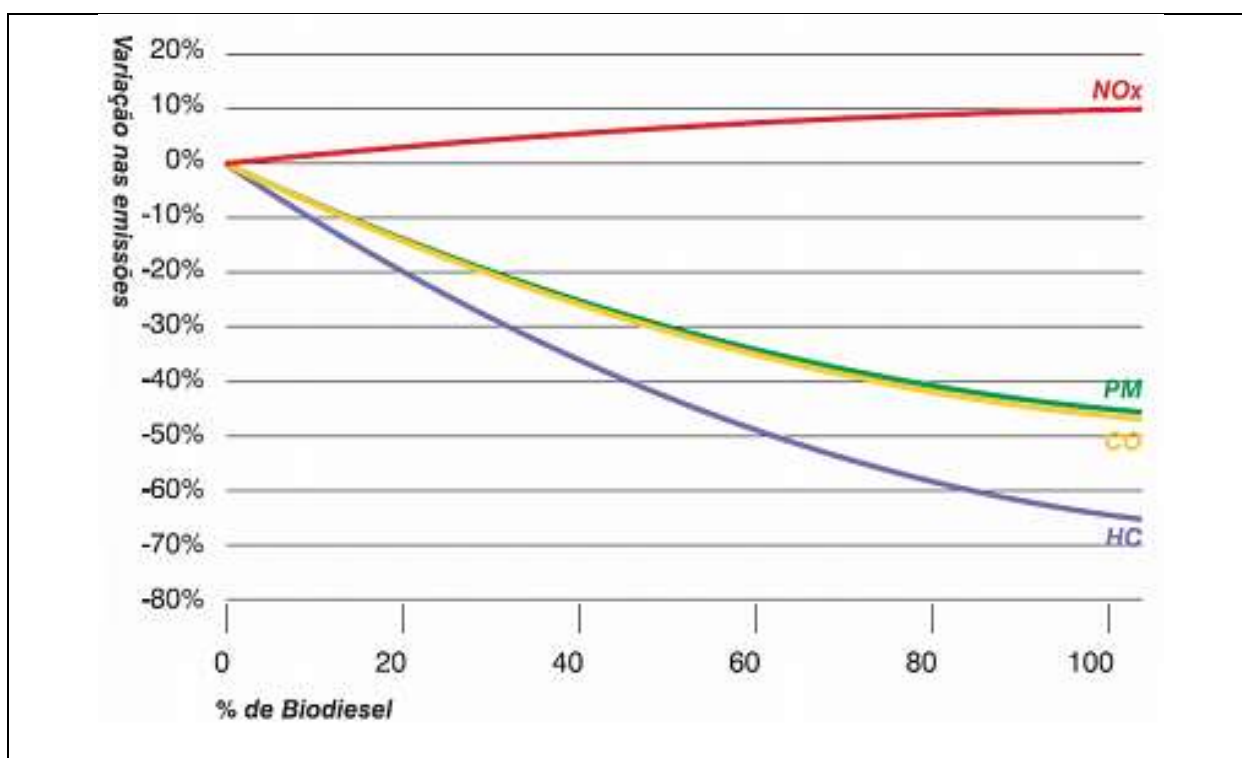


Figura 10. Variação das emissões de poluentes (HC, CO e NOx) em função da adição de biodiesel.
Fonte: United States Environment Protection Agency, 2002.

O biodiesel puro (B100) produzido com óleo de soja, quando queimado, devido a diversas aplicações, mostra uma redução de 48% de emissões de monóxido de carbono, 47% de material particulado, aproximadamente 100% de enxofre e 67% dos hidrocarbonetos, conforme figura 10.

2.5.1. Emissões poluentes resultantes da combustão do biodiesel

No motor ocorre a queima do combustível e a liberação de emissões na atmosfera, sendo algumas delas prejudiciais ao meio ambiente. As principais emissões poluentes resultantes da combustão do biodiesel são óxidos nítricos (NO_x), monóxido de carbono (CO) e hidrocarbonetos não queimados (UHC) (MOREIRA, 2017).

Para Feng e Lu (2015), as emissões de material particulado (MP) e de NO_x possuem restritos limites impostos aos fabricantes de motores do ciclo Diesel. Isso têm estimulado a busca por pesquisas para o desenvolvimento de soluções para gases emitidos por esse tipo de motor. Atualmente, a redução do NO_x ocorre por meio de um processo de redução catalítica (SCR), com adição de ureia, ou pela recirculação dos gases do motor (EGR), ou ainda pela associação de ambas em um conjunto de filtros.

Rakopoulos, Rakopoulos e Giakoumis (2015) estudam as emissões de NO_x por motores de combustão com uma mistura de diesel e biodiesel em diferentes proporções. O resultado foi que um aumento na parcela de biodiesel na mistura modifica a relação ar-combustível na câmara de combustão, favorecendo a formação de NO_x. A influência em sua produção está diretamente ligada ao tipo de motor, o regime de rotação e a carga efetiva do motor.

A formação de NO_x nos motores de combustão pode ser térmico, em temperaturas elevadas, tais como aquelas que ocorrem no interior da câmara de combustão de um motor a diesel, e por meio da reação entre o nitrogênio e o oxigênio, que são reações em cadeia conhecidas como mecanismo de Zeldovich, expresso nas equações 7, 8 e 9 (RIBAS et al, 2016).



Além disso, a formação do “NO_x prompt” que ocorre na câmara de combustão, consiste na reação de fragmentos de hidrocarbonetos intermediários da combustão de combustíveis, como o CH e o CH₂ com nitrogênio e do NO_x combustível, em que as espécies contendo nitrogênio são oxidadas a NO durante a combustão dentro de um motor diesel (RIBAS et al, 2016).

O uso de biodiesel pode resultar em benefícios pela diminuição das emissões de CO, HC e MP. Porém, como ponto negativo traz o aumento de NO_x, um problema que deve ser atenuado. A

diminuição desses problemas pode ser feita a partir de adaptações no motor, assim como através de alterações no combustível. Paralelamente, deve-se proceder o controle dos gases e partículas provenientes da combustão (HOEKMAN e ROBBINS, 2012).

Assim, uma análise das emissões do biodiesel torna-se evidentemente necessária e a mesma é realizada por meio do *Software Chemical Equilibrium with Applications*. Ainda, o estudo do comportamento dentro do motor do ciclo diesel é primordial para validação do uso do biocombustível, sendo esse feito através do *Software Diesel-RK*.

2.6. *Software Chemical Equilibrium with Applications* – CEA

O programa computacional da NASA CEA (*Chemical Equilibrium with Applications*) tem como propósito o cálculo das composições de equilíbrio químico e das propriedades de misturas complexas. As suas aplicações são feitas em estados termodinâmicos projetados, desempenho teórico de foguetes, detonações de Chapman-Jouguet e parâmetros do tubo de choque para choques incidentes e refletidos.

Dos últimos 45 anos, esse *software* é um dos mais recentes programas desenvolvidos pelo Centro de Pesquisa NASA Lewis. Houveram diversas alterações nesses programas, a fim do desenvolvimento de técnicas adicionais. Além disso, estão associados bancos de dados independentes com propriedades termodinâmicas e de transporte, contendo mais de 2000 espécies.

Segundo Snyder (2016), o *software* foi escrito no padrão Fortran por Bonnie J. McBride e Sanford Gordon e é amplamente utilizado para finalidades termodinâmicas e aerodinâmicas. É um *software* que consiste no cálculo das concentrações de produtos de equilíbrio químico de qualquer conjunto de reagentes, com a função de determinar as propriedades termodinâmicas e de transporte da mistura de produtos. Apresenta detalhadamente vários tópicos de interesse geral nos cálculos de equilíbrio químico. Esses tópicos incluem (SNYDER, 2018):

- Análise matemática e técnicas para obter equilíbrio químico;
- Fórmulas para obter propriedades termodinâmicas e de mistura de transporte e derivados termodinâmicos;
- Critérios para inclusão de fases condensadas;
- Cálculos em um ponto triplo;
- Inclusão de espécies ionizadas;

- Outras aplicações, como combustão de pressão constante ou volume constante, desempenho de foguetes com base em um modelo de área de câmara finita ou infinita, cálculos de ondas de choque e detonações de Chapman-Jouguet.

O manual do usuário tem como objetivo facilitar o uso do CEA na solução de problemas termodinâmicos e de combustão. Os tópicos incluem (SNYDER, 2018):

- Preparação de arquivos de entrada;
- Formato da saída;
- Discussão da organização geral do programa.

Além disso, são discutidos os formatos usados para os arquivos termodinâmicos e de dados de transporte associados. São apresentados vários exemplos para ilustrar a versatilidade do programa. A figura 11 apresenta a tela inicial do programa.

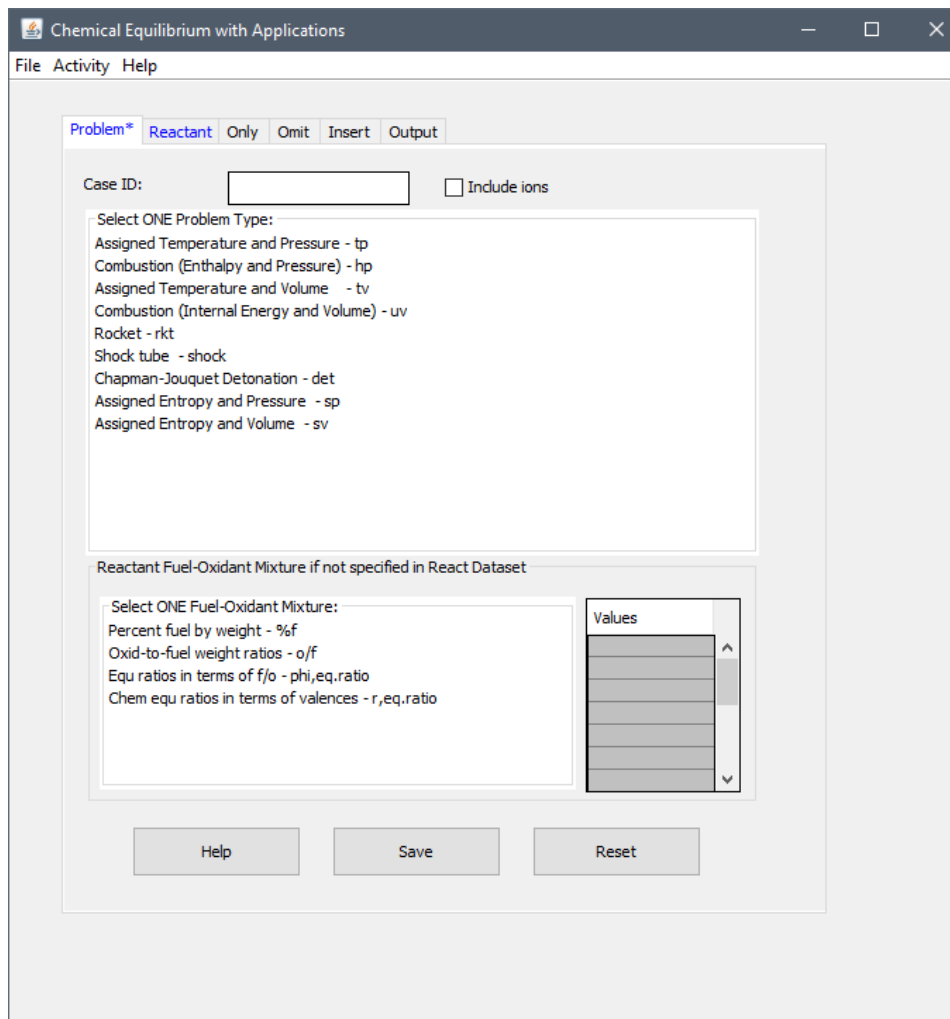


Figura 11. Tela inicial do *software CEA NASA*.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme a figura 11, serão selecionados na pesquisa o problema, os reagentes, os dados, as exceções, o que será inserido e obtido no *software CEA* para posterior estudo das emissões.

2.7. *Software Diesel-RK*

O *software Diesel-RK* é um simulador de motores termodinâmicos de ciclo completo. O motivo de sua criação foi para promover a simulação e otimização de processos de trabalho de motores de combustão interna de dois e quatro tempos com todos os tipos de impulso. O programa pode ser utilizado para modelar os seguintes tipos de motores (KULESHOV, 2021):

- Motores diesel de injeção direta (*DI Diesel engine*), incluindo Ignição por compressão de carga pré-misturada (PCCI) e motores alimentados por biocombustíveis;
- Motores a gasolina de ignição a faísca (*SI Petrolengine*);
- Motores a gás de ignição a faísca (*SI gasengine*), incluindo sistemas pré-câmara, e motores alimentados por diferentes gases: metano, propano-butano, biogás, gás de madeira, entre outros;
- Motores de dois tempos com fluxo uniforme, motores de pistões opostos e motores OPOC (pistões opostos e cilindros opostos);
- Motores de duplo combustível (Motores a ignição por compressão controlada - RCCI).

De acordo com Kuleshov (2021), o *software* é uma ferramenta termodinâmica. Os cilindros do motor são considerados como sistemas termodinâmicos abertos. As suas aplicações incluem:

- Previsão e otimização do consumo de combustível;
- Previsão da curva de binário e outras previsões de desempenho do motor;
- Análise de combustão e emissões, incluindo PCCI / HCCI;
- Formação de misturas de combustível duplo do motor e análise de combustão;
- Predição de batidas;
- Otimização da temporização das válvulas, incluindo a otimização de acionamento da válvula variável (VVA) para cada modo de funcionamento;
- Análise e otimização da recirculação do gás de escape (EGR);
- Combinação e otimização de turbocompressores e derivações;
- Conversão de motores diesel em motores a gás;
- Cooperação com diferentes ferramentas de modelação, como *Simulink* e *IOSO NM*.

As principais características do *Diesel-RK* são semelhantes aos programas conhecidos: *WAVE* (Ricardo *Software*), *GT-Power* (Tecnologias Gama) e *BOOST* (AVL). No entanto, em

conjunto com as capacidades convencionais, o programa tem características avançadas (KULESHOV, 2021):

- Modelo RK: é um modelo de formação e combustão de mistura de combustível diesel multi-zona;
- Ferramenta de visualização de combustível em spray (fácil plano e 3D avançado);
- Otimização multiparamétrica e multidimensional dos parâmetros dos motores. Uma função alvo incluindo NO_x, fuligem e SFC simultaneamente pode ser calculada como dentro do *Diesel-RK*, como com o procedimento definido pelo utilizador a ser feito como DLL e ligado com o núcleo do *Diesel-RK*;
- Procedimentos de pesquisa paramétrica 1D e 2D;
- Mecanismo cinético detalhado de formação de NO (199 reações, 33 espécies) é implementado para PCCI, injeção múltipla e análise de EGR elevado;
- *Diesel-RK* suporta simulação de injeção de água e contabilização da condensação e evaporação de H₂O no coletor de admissão, porta e cilindro.

Para Kuleshov (2021), o modelo RK simula a formação de mistura e combustão considerando:

- Forma da bacia do pistão: quaisquer formas geométricas podem ser especificadas e guardadas na base de dados da bacia do pistão que já inclui as geometrias mais comuns;
- Diferentes perfis e intensidades rotacionais;
- Localização do pulverizador: central, não central, injeção lateral, poucos pulverizadores;
- Número, diâmetro e direção dos pulverizadores (cada pulverizador pode ter injetores com diâmetros diferentes e orientação arbitrária);
- Propriedades dos combustíveis, incluindo biocombustíveis e misturas de biocombustíveis com óleo diesel;
- Forma do perfil de injeção, incluindo injeção múltipla e PCCI; Otimização da forma dos flancos do perfil de injeção; Otimização da estratégia de injeção múltipla;
- Os detalhes químicos são calculados na previsão de atraso de ignição para PCCI com combustível diesel e biocombustível. O modelo RK contabiliza um efeito de alta pressão CR no atraso de ignição;
- A combustão a baixa temperatura é modelada em PCCI e HCCI;
- Interação dos sprays com as paredes e com outros vizinhos;
- Temperatura local da parede na região de impacto dos sprays com uma parede.

O modelo RK tem a capacidade de otimizar a forma da bacia do pistão e os parâmetros do sistema de injeção de combustível (direção dos pulverizadores, diâmetro e número de injetores), bem como de desenvolver uma estratégia de injeção múltipla e o algoritmo de controle em toda a gama de funcionamento (KULESHOV, 2021). A figura 12 mostra a tela inicial do *software Diesel-RK*.

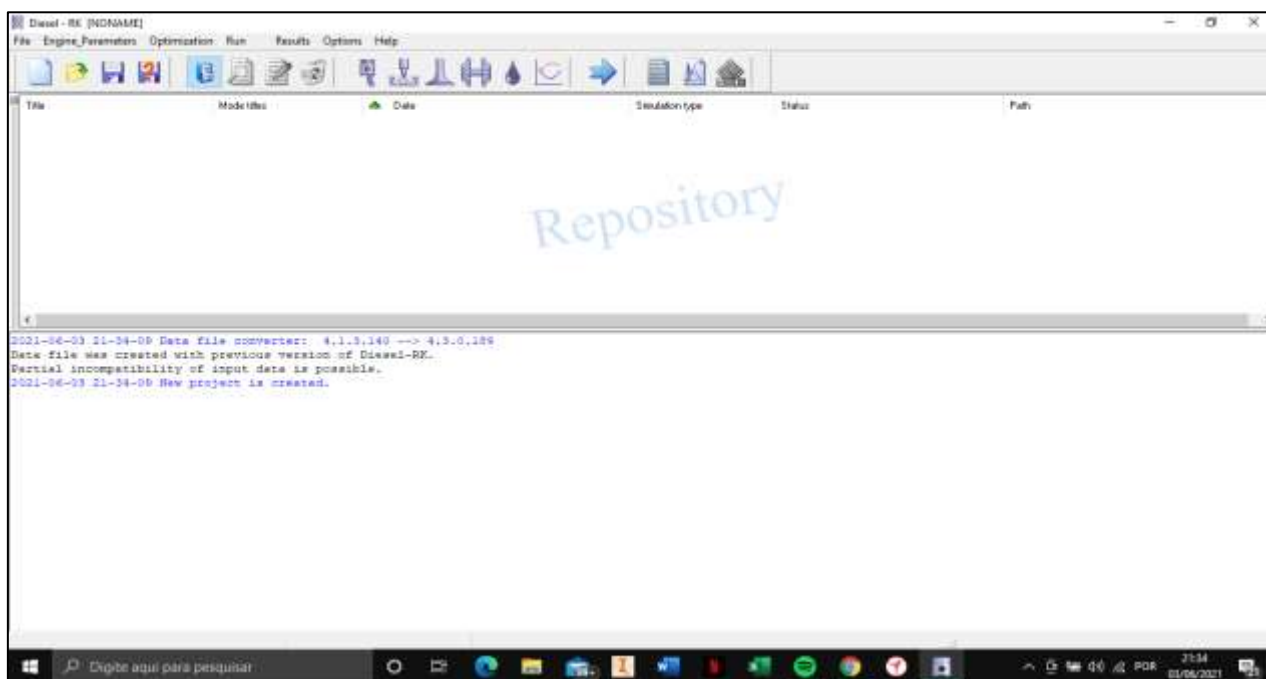


Figura 12. Tela inicial do *software Diesel-RK*.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Como mostra a figura 12, o *software* de simulação apresenta diversas funções, dentre elas a possibilidade de análise gráfica e do comportamento do combustível escolhido. A aba principal do *Diesel-RK* mostra várias das alternativas que podem ser selecionadas, e serão detalhadas no capítulo 4.

2.8. Considerações Finais

As referências teóricas fundamentais para a pesquisa foram desenvolvidas neste capítulo, descrevendo os conceitos de energia, combustão, sustentabilidade, biodiesel, avaliação técnica, *software Chemical Equilibrium with Applications* – CEA e *software Diesel-RK*, os quais são essenciais para o desenvolvimento do trabalho.

3. METODOLOGIA

Neste capítulo é retratada a característica do desenvolvimento da pesquisa feita, com o objetivo de definir sua natureza e classificação, a área de pesquisa, método e instrumentos de coleta utilizados. Além disso, determinar as variáveis e indicadores adotados, a fim de realizar as análises e os cálculos necessários.

3.1. Tipos de pesquisa

A ciência tem o intuito de certificar a veracidade dos fatos. Para tanto, utiliza-se do método científico a fim de definir diretrizes e orientações sobre a forma de desenvolvimento do trabalho da pesquisa, as técnicas usadas, a sequência de atividades, entre outros (GIL, 1991).

Entende-se o método científico como uma série de regras básicas que tem como objetivo a ampliação de conhecimento científico e a resolução de problemas. A finalidade desse método é a pesquisa e a determinação do assunto abordado (ALMEIDA, 2017).

Segundo Shitsuka (2018), a partir da observação dos fatos pode-se realizar a prática de experiências, a dedução lógica e a comprovação científica dos resultados atingidos. Existem dois meios de realizar a pesquisa científica através de métodos qualitativos e quantitativos. O primeiro método é caracterizado pela necessidade da interpretação do pesquisador acerca do material de estudo.

Para Ludke e André (2013), os fatores que definem a pesquisa qualitativa são:

- O pesquisador atua diretamente como principal instrumento;
- Há coleta de dados descritiva;
- Maior preocupação com o processo quando comparada ao produto;
- O “significado” dado aos objetos da pesquisa;
- Análise de dados e informações indutiva.

Por conseguinte, a pesquisa qualitativa tem como finalidade investigar as características e cenários que apresentem maiores dificuldades de determinação por variáveis.

De acordo com Shitsuka (2018), existe a possibilidade da transformação do método qualitativo em quantitativo, através do emprego da escala Likert. O método quantitativo consiste na coleta de dados quantitativos ou numéricos por meio da utilização de instrumentos de medição de grandeza e da metrologia. Então sua análise é realizada através de técnicas matemáticas, como as porcentagens, estatísticas e probabilidades, métodos numéricos, analíticos e da geração de equações matemáticas com propósitos voltados a determinado processo.

Os métodos qualitativos e quantitativos podem ser complementares e permitem uma melhor compreensão do processo, portanto há entre eles uma relação não excludente (YIN, 2001).

Esse método pode ser definido como exploratório, com o intuito do esclarecimento, desenvolvimento e transformação de ideias e conceitos, realizado por meio de pesquisas bibliográficas, documentais, entrevistas e estudos de caso. Ademais, possibilita sugestões sobre certo fato de modo descritivo ou explicativo. No primeiro são realizadas observações, análises e descrições a respeito de determinados atributos, estabelecendo uma relação entre as variáveis do processo, destacando-se a técnica de coleta de dados. Já no modo explicativo é realizada a identificação dos fatores contribuintes e a determinação dos fenômenos, mediante a elucidação da razão e causa dos acontecimentos (SHITSUKA, 2018).

Em relação aos procedimentos técnicos, a pesquisa classifica-se como bibliográfica, experimental, documental, histórica, levantamento, estudo de caso, exposição de fatos, pesquisa-ação e observação de um não participante no processo.

A pesquisa bibliográfica destaca-se no desenvolvimento do procedimento, uma vez que se baseia em livros e obras acadêmicas, além de estudos de caso e experimentos. Por outro lado, a pesquisa experimental é responsável pela manipulação de variáveis controladas, com o intuito de observar, examinar e interpretar os resultados, por meio de técnicas especiais e equipamentos adequados (GIL, 1991).

Aliás, para Fonseca (2002) há a pesquisa documental, a qual é realizada através de variadas fontes, considerando os fatos de forma imparcial e a pesquisa participante, que consiste no envolvimento e identificação do pesquisador com os investigados.

Segundo Yin (2001), existe também a pesquisa-ação definida mediante as bases empíricas em estreita associação com uma ação ou uma resolução de certo problema, em que há envolvimento direto dos pesquisadores e participantes no problema.

Entende-se estudo de caso como um amplo e detalhado conhecimento, que permita o planejamento lógico, da coleta e da análise de dados (YIN, 2001). Este autor apresenta como exemplo a investigação sobre ideologias e posições sobre certa adversidade.

Neste trabalho é realizado uma pesquisa quantitativa, uma vez que usufrui de dados numéricos, cálculos e procedimentos específicos, a fim de analisar determinado processo. Relativamente ao objetivo, expressa-se como uma pesquisa exploratória, pois é realizada a avaliação técnica da combustão do biodiesel e também quantificada suas emissões resultantes com o objetivo de geração de energia.

No que concerne a esse trabalho, é feita uma pesquisa bibliográfica visando a fundamentação teórica necessária ao desenvolvimento do projeto, com o intuito de realizar o estudo de caso, contando com pesquisas em livros, teses, artigos, dissertações e com a realização de simulações nos *softwares Chemical Equilibrium with Applications (CEA)* e *Diesel-RK*.

3.2. Materiais e Métodos

Com a finalidade de avaliar tecnicamente a emissão da combustão do biodiesel, com vistas a geração de energia e sustentabilidade, será realizado, primeiramente, um estudo bibliográfico. A figura 13 contém a representação do fluxograma para melhor organização e entendimento das etapas para a consumação deste trabalho.

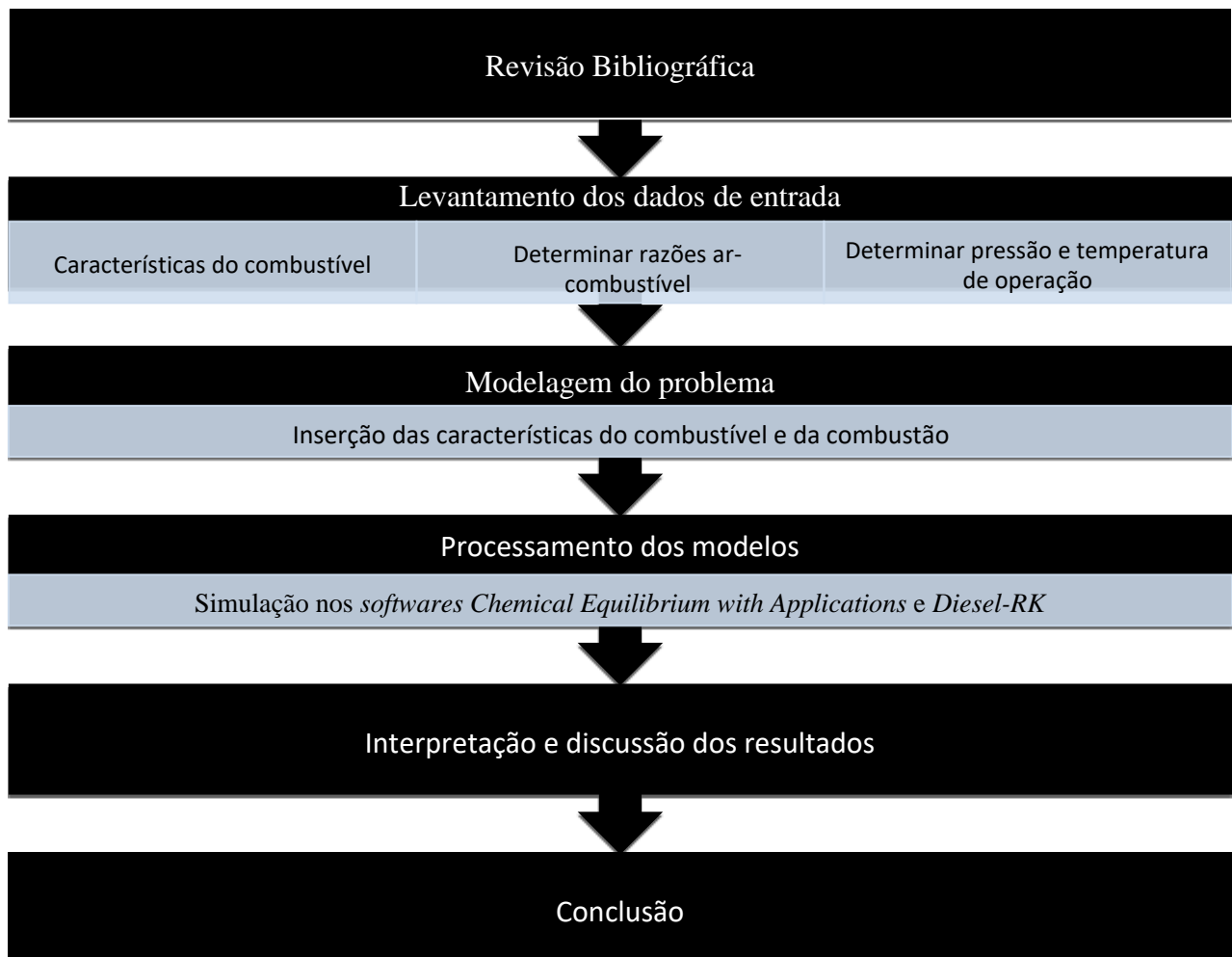


Figura 13. Fluxograma das etapas da realização do trabalho.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Primeiro é realizada a revisão bibliográfica acerca da pesquisa, abrangendo o estudo sobre energia, combustão, sustentabilidade, biodiesel, *softwares CEA e Diesel-RK*. Sequencialmente, o levantamento dos dados de entrada, considerando as características do biodiesel, a determinação da razão ar-combustível, da pressão e da temperatura necessárias para a realização do procedimento.

O processamento dos modelos é realizado através de simulações no *software Chemical Equilibrium with Applications*, com o objetivo de analisar matematicamente e de obter o equilíbrio químico, obter as propriedades termodinâmicas que influem no sistema e realizar a combustão a pressão constante. Ainda, facilitar ao usuário a preparação e visualização de arquivos de entrada, o formato da saída e discussão da organização geral do programa. O procedimento realizado neste trabalho está no Apêndice 1.

Além do mais, é também feita a simulação e análise do comportamento das emissões provenientes da combustão que ocorrem dentro do motor de ignição por compressão, por meio do *software Diesel-RK*, detalhando as suas características. O procedimento realizado neste trabalho usando o *software Diesel RK* está no Apêndice 2.

Em seguida, o modelamento considera as propriedades da pesquisa com o intuito de viabilizar a utilização de biodiesel como combustível e suas emissões. Por fim, através do *Microsoft Excel*, os dados obtidos são analisados e concluídos sobre o tema.

3.3. Variáveis e Indicadores

Entende-se variável como qualquer meio que pode ser classificado em duas ou mais categorias. Além disso, é considerada uma medida ou classificação, uma quantidade variável, um conceito operacional com valores, propriedades, aspecto ou fator, identificado em um objeto de estudo e passível de verificação (GIL, 2007).

Os indicadores do conceito ou da variável são a definição operacional dos elementos que possibilitarão identificá-lo de maneira prática. Caso seja muito complexo, será necessário determinar suas dimensões, através de medidas (GIL, 1991).

De acordo com o estudo das variáveis e de sua medição, existem indicadores que são selecionados de acordo com os objetivos da pesquisa, podendo ser classificados de forma qualitativa ou quantitativa. Referente às definições apresentadas e os objetivos do trabalho, representada pela tabela 8, em que são mostrados as variáveis e os indicadores.

Tabela 8. Variáveis e Indicadores deste trabalho.

Variáveis	Indicadores
Biodiesel	<ul style="list-style-type: none"> ● Características químicas; ● Características físicas;
Combustão	<ul style="list-style-type: none"> ● Razão oxidante combustível; ● Temperatura de operação; ● Pressão de operação;
Emissões	<ul style="list-style-type: none"> ● Tipo de combustível; ● Eficiência da combustão; ● Razão oxidante combustível.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

3.4. Instrumento e Coleta de Dados

Nessa etapa é realizada a coleta de dados com a finalidade de obter o embasamento teórico fundamental da pesquisa por meio de revisões bibliográficas, análises e experimentos.

Como citado nesse capítulo, esse projeto é de caráter bibliográfico, quantitativo e descritivo, nos quais os dados são obtidos a partir de livros, teses, artigos, dissertações, manuais, catálogos, entre outros. Para mais, a realização de uma observação direta com a intenção de analisar dados teóricos e práticos e do estudo de caso feito posteriormente, a fim de acumular informações úteis para comparar os dados teóricos e os dados disponíveis na literatura.

3.5. Tabulação de Dados

Por meio dos dados obtidos pela teoria, são realizados o modelamento do problema e a análise dos dados obtidos no *software Chemical Equilibrium with Applications*, através do cálculo das composições de equilíbrio químico e das propriedades de misturas complexas e também a simulação, a otimização e o estudo do comportamento do biodiesel dentro do motor e das suas emissões na atmosfera pelo *software Diesel-RK*. Além disso, será realizado o estudo dos resultados com o *Microsoft Excel* e por fim, a discussão e relato dos resultados será feito no *Microsoft Word*.

3.6. Considerações Finais do Capítulo

Por fim, esse capítulo consiste na realização da classificação do tipo de pesquisa, destacando quais são as ferramentas e as técnicas usadas, com o intuito de realizar a análise requerida. Ademais, são apresentados os materiais e métodos empregados para o desenvolvimento da pesquisa. No capítulo seguinte são apresentados os resultados obtidos e na análise realizada através dos resultados disponibilizados pelos softwares *Chemical Equilibrium with Applications* e *Diesel-RK*, gerando dados com a finalidade de comparação.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo será retratado a característica do desenvolvimento da pesquisa feita, com o objetivo de mensurar, conferir e analisar as variáveis do projeto baseadas nos resultados dos softwares *Chemical Equilibrium with Applications* e *Diesel-RK*, a fim de averiguar a importância e relevância do projeto.

4.1. Propriedades Físicas e Químicas dos Fluidos

Com o intuito de comparar os resultados da combustão no *software CEA NASA* foram utilizados os fluidos Jet-A (semelhante ao óleo diesel) e biodiesel de sebo bovino.

A composição do diesel convencional é formada por diferentes cadeias de hidrocarbonetos com 14 a 18 átomos de carbono, contendo HC aromáticos, como benzeno e outros, como o enxofre. Contudo, o biodiesel é composto por cadeias lineares de hidrocarbonetos com 14 a 20 átomos de carbono e ao contrário do fluido citado acima não contém HC aromáticos, enxofre, metais ou resíduos resultantes do óleo bruto (MORAES, 2008).

Os biocombustíveis originados da gordura animal possuem uma combustão eficiente e propriedades comparáveis a do diesel, logo a importância de seu estudo deve ser ressaltada.

A pecuária brasileira é uma das maiores do mundo e seus subprodutos são destinados a variados fins. Resultante das indústrias alimentícias, o sebo bovino é utilizado na fabricação dos produtos de limpeza e de higiene, bem como na produção de biodiesel (MARTINS, 2011). Dentre a gama de opções, essa pesquisa utiliza o biodiesel de sebo bovino por ser de fácil obtenção e de custo relativamente baixo.

A resolução da ANP N° 15 de 2006 determina limites de propriedades do diesel e biodiesel, como a volatilidade do fluido, massa específica (a 20°C) para o diesel e para a mistura diesel/biodiesel B2 de 820 a 865 e 820 a 880 kg/m³, respectivamente. Além disso, como a fluidez, o ponto de fulgor mínimo para ambos é de 38°C e a viscosidade cinemática máxima a 40°C, de 2 a 5 mm²/s.

Logo, para obter as características do biodiesel de sebo bovino (B100), as propriedades citadas são referência, assim como as mostradas na tabela 9.

Tabela 9. Propriedades do biodiesel de sebo bovino.

Propriedades	Método	B100
Massa específica a 20°C (kg/m ³)	ASTM D-1298	872
Ponto de Fulgor Mínimo (°C)	ABNT/NBR 14598	156,7
Viscosidade cinemática a 40°C (mm ² /s)	ABNT/NBR 10441	5,3

Fonte: Moraes, 2008.

Os métodos explícitos na tabela 9 foram os meios de obtenção das propriedades do biodiesel de sebo bovino a partir dos limites estipulados pela ANP N° 15 de 2006, determinando sua massa específica, ponto de fulgor mínimo e viscosidade cinemática máxima. A tabela 10 mostra o percentual de cada éster metílico resultante da análise quantitativa de biodiesel de sebo bovino (MORAES, 2008).

Tabela 10. Composição quantitativa do biodiesel de sebo bovino.

Pico	Ácido	Fórmula (ésteres metílicos)	Biodiesel de sebo
1	Láurico (PI)	$C_{13}H_{26}O_2$	-
2	Mirístico	$C_{15}H_{30}O_2$	4,36
3	Pentadecanóico	$C_{16}H_{32}O_2$	1,62
4	Palmitoleico	$C_{17}H_{32}O_2$	2,23
5	Palmítico	$C_{17}H_{34}O_2$	26,42
6	Heptadecanóico	$C_{18}H_{36}O_2$	1,54
7	Linoléico	$C_{19}H_{34}O_2$	0,86
8	Oléico (isômero cis)	$C_{19}H_{36}O_2$	26,58
9	Elaídico (isômero trans)	$C_{19}H_{36}O_2$	1,92
10	Estearíco	$C_{19}H_{38}O_2$	34,47
Total de saturados			68,41
Total de insaturados			31,59

Fonte: Moraes, 2008.

De acordo com a tabela 10, os ésteres metílicos de sebo bovino apresentam um maior percentual de compostos saturados, destacados em negrito, o que traz vantagens como alto número de cetano e menor chance de oxidação e polimerização, quando comparados aos insaturados. Porém, em baixas temperaturas apresentam tendência de cristalização, ocasionando uma limitação ao seu uso em climas frios.

Outra propriedade importante a ser comparada está representada na figura 14.

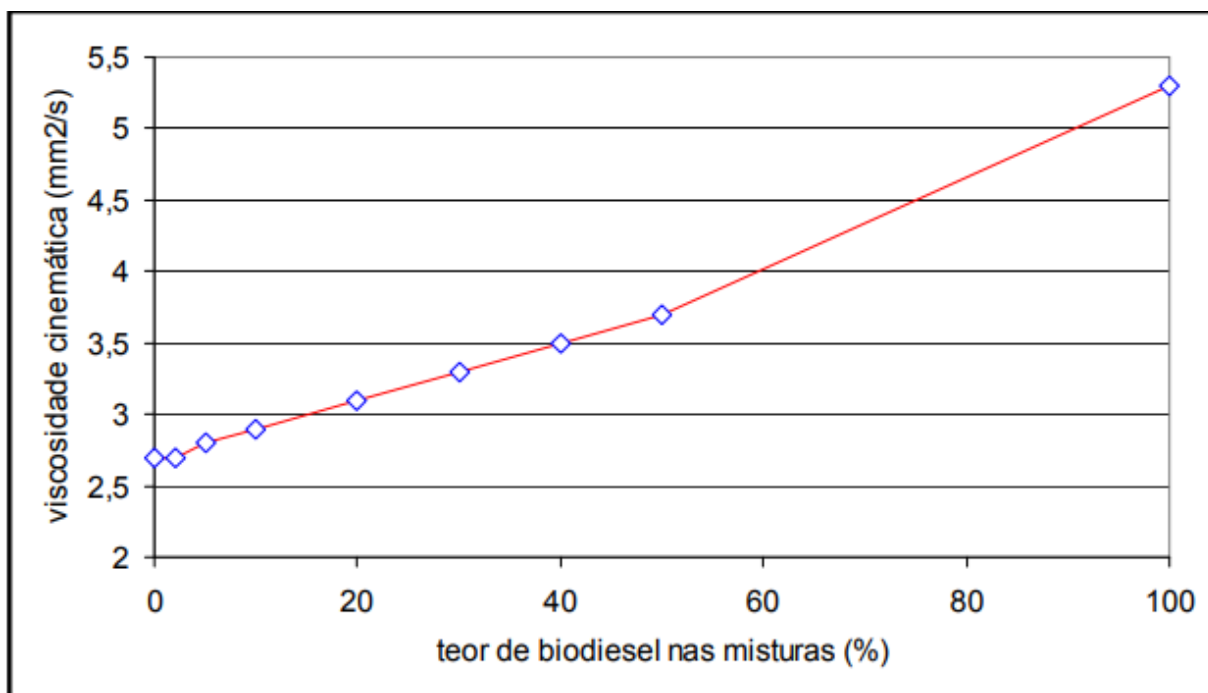


Figura 14. Variação da viscosidade cinemática para diesel metropolitano (D100), biodiesel (B100) de sebo e misturas.

Fonte: Moraes, 2008.

Observa-se na figura 14 que o biodiesel de sebo (B100) apresenta a maior viscosidade cinemática, logo é importante obter uma boa atomização do óleo e preservação de suas características lubrificantes para que a combustão dentro do motor ocorra de forma satisfatória.

4.2. Análise da combustão realizada pelo *software CEA*

O *software Chemical Equilibrium with Applications* disponibiliza as propriedades termodinâmicas na combustão dos combustíveis para cada interação inserida no programa inicial, descrito no Apêndice 1. Logo, são feitas simulações utilizando o Jet-A e o biodiesel de sebo bovino e seus resultados comparados. Sendo eles: pressão, temperatura, massa específica, e peso molecular de saída do gás de combustão.

A tabela 11 mostra a variação das propriedades termodinâmicas para a combustão do Jet-A para a razão de equivalência (ϕ) variando de 0,8 a 1,0, intervalo entre a combustão pobre e a combustão estequiométrica e de 1,0 a 1,2, intervalo entre a combustão estequiométrica e a combustão rica, obtidas através da execução do *software CEA*.

Lembrando que a combustão pobre é aquela em que há menos combustível disponível durante a queima na relação ar-combustível, logo a rica é o inverso, isto é, a combustão da mistura ar-combustível apresenta mais combustível e menos ar.

Tabela 11. Propriedades Termodinâmicas da combustão do Jet-A para phi variando de 0,8 a 1,2.

Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 0,8					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2046,07	2049,8	2051,58	2052,7	2053,48
Massa específica [kg/m ³]	0,1717	0,3429	0,5139	0,6849	0,8559
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,8280	28,8360	28,8400	28,8420	28,8440
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 0,9					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2183,63	2193,89	2199,04	2202,33	2004,69
Massa específica [kg/m ³]	0,1605	0,31975	0,47869	0,63745	0,7961
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,7600	28,7820	28,7930	28,8000	28,8050
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 1,0					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2270,16	2288,16	2297,89	2304,44	2309,32
Massa específica [kg/m ³]	0,15345	0,3049	0,45575	0,60623	0,75646
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,5860	28,6240	28,6450	28,6590	28,8670
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 1,1					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2270,4	2281,53	2286,76	2289,96	2292,17
Massa específica [kg/m ³]	0,15154	0,30185	0,45191	0,60184	0,7517
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,2330	28,2560	28,2660	28,2730	28,2780
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 1,2					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2206,27	2210,5	2212,39	2213,52	2214,29
Massa específica [kg/m ³]	0,15333	0,30618	0,45894	0,61166	0,76235
Peso molecular de saída [kg/kmol]	27,7600	27,7690	27,7730	27,7750	27,7760

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme a tabela 11, o aumento da pressão de 101,325 kPa a 506,63 kPa (400%) em uma mesma razão de equivalência (0,8 por exemplo), tem pouca influência no aumento da temperatura de chama adiabática de 2046 K até 2053 K (0,34%) e mesmo aumento na massa específica. Para uma mesma pressão de 101,325 kPa, o aumento da razão de equivalência de 0,8 a 1,0 influencia no aumento da temperatura de chama adiabática em aproximadamente 11% e na redução

de aproximadamente 11% da massa específica. Para a pressão de 506,63 kPa, o aumento da temperatura de chama é de 12,5% e a redução da massa específica de 11,6%. O peso molecular possui valores semelhantes, variando apenas nas casas decimais para cada razão de equivalência, variando-se a pressão de 101,325 kPa a 506,63 kPa.

No caso para a combustão estequiométrica ($\phi = 1,0$) a combustão rica ($\phi = 1,2$), as propriedades dos gases de combustão apresentam valores decrescentes, e a massa específica com variações mínimas.

Para uma melhor visualização e análise, a partir dos dados disponibilizados na tabela 11, para o caso da razão de equivalência variando de 0,8 a 1,0 (pobre a estequiométrica), foi gerado um gráfico no *Excel* contendo os resultados das variações percentuais na combustão do Jet-A entre os valores de temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre com relação a combustão estequiométrica, por meio dos dados disponibilizados pelo *software*, representado pela figura 15.

Já a figura 16 mostra os resultados da variação percentual da temperatura e peso molecular de saída para uma combustão rica ($\phi=1,2$) comparados com a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$).

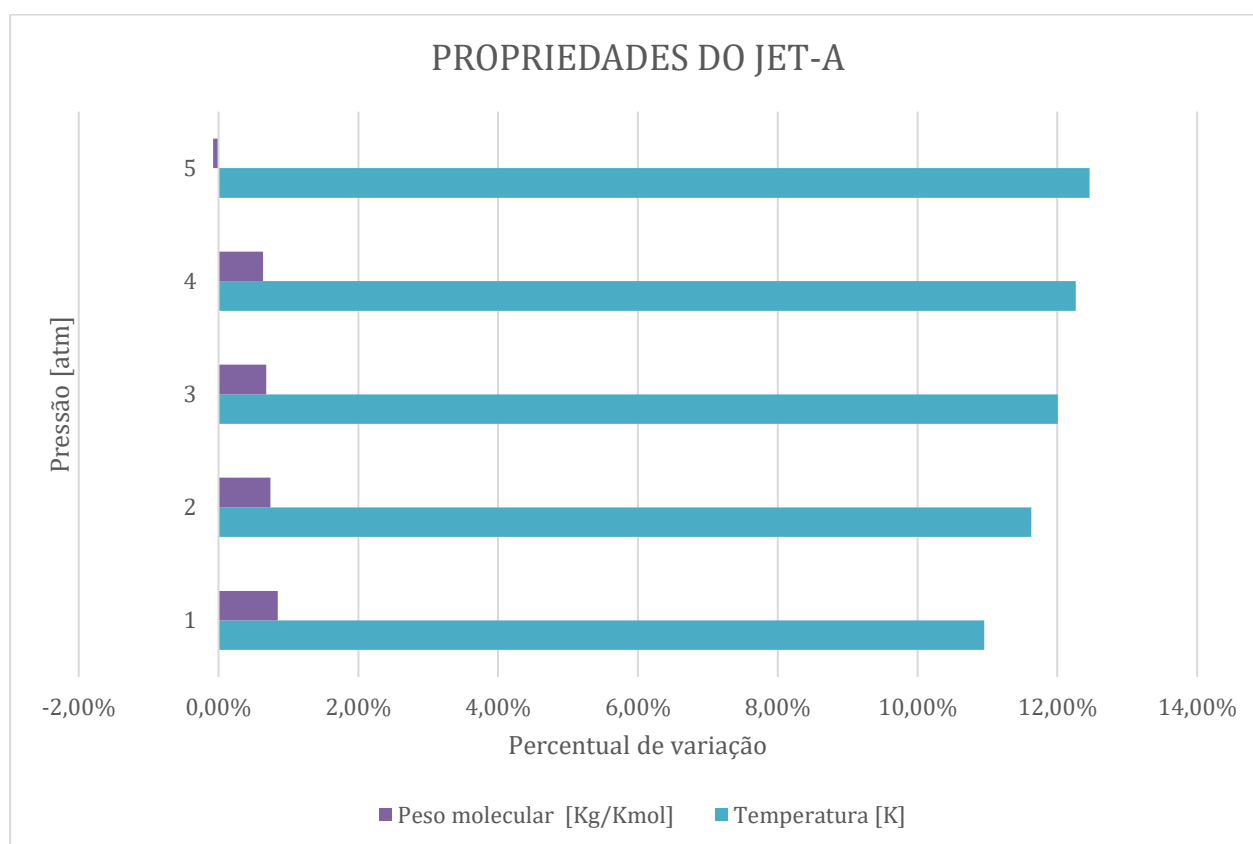


Figura 15. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre ($\phi=0,8$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no Jet-A.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

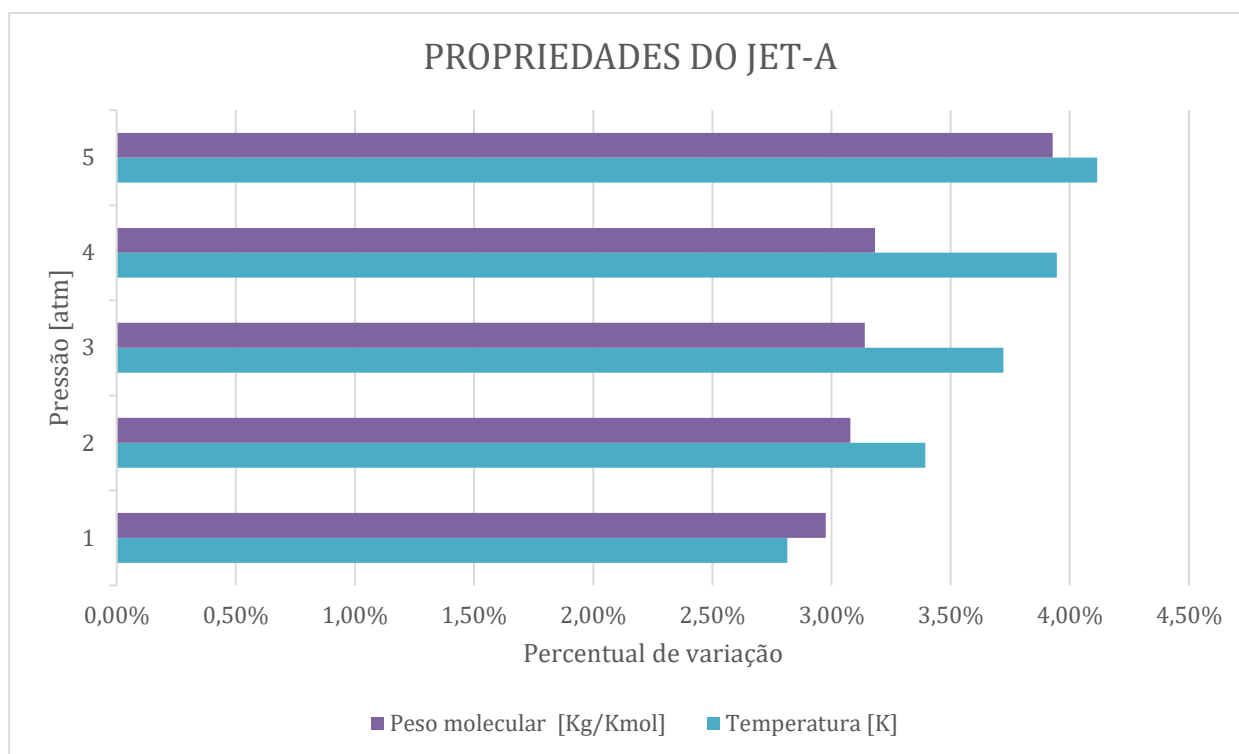


Figura 16. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão rica ($\phi=1,2$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no Jet-A.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Observa-se na figura 15, que a variação percentual do peso molecular de saída apresenta valores semelhantes para o intervalo de pressão de 1 a 4 atm, sofrendo uma maior variação quando a pressão atinge 5 atm. Neste caso, a variação percentual foi de 0,85% (pressão de 1 atm) a 0,64% (pressão de 4 atm), isto é, com apenas 0,21% de diferença, porém ao chegar a 5 atm torna-se negativo. Por outro lado, a temperatura apresenta valores crescentes, os quais vão desde 11% (pressão de 1 atm) até 12,5% (pressão de 5 atm).

Como mostra a figura 16, a variação percentual do peso molecular de saída apresenta valores crescentes e semelhantes, para o intervalo de pressão de 1 a 4 atm, variando mais na de 5 atm. Logo, a variação percentual foi pequena, desde 2,98% (pressão de 1 atm) a 3,18% (pressão de 4 atm) e 3,93% (pressão de 5 atm). Já a temperatura apresenta valores que vão desde 2,81% (pressão de 1 atm) até 4,12% (pressão de 5 atm).

Do mesmo modo, o *software* disponibiliza a variação das propriedades termodinâmicas da combustão do biodiesel de sebo bovino para a razão de equivalência (ϕ) variando de 0,8 a 1,2, intervalo entre a combustão pobre e a combustão rica, passando pela combustão estequiométrica ($\phi=1,0$), representado na tabela 12.

Tabela 12. Propriedades Termodinâmicas da combustão do biodiesel para phi variando de 0,8 a 1,2.

Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 0,8					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2150,22	2157,29	2160,74	2162,92	2164,47
Massa específica [kg/m ³]	0,163	0,32511	0,5487	0,64879	0,8105
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,7600	28,7750	28,7830	28,7880	28,7910
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 0,9					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2276,91	2292,71	2300,94	2306,33	2310,25
Massa específica [kg/m ³]	0,1533	0,30486	0,45594	0,60675	0,75737
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,6430	28,6780	28,6960	28,7070	28,7160
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 1,0					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2353,87	2376,94	2389,61	2398,23	2404,7
Massa específica [kg/m ³]	0,14717	0,29199	0,43607	0,57972	0,72305
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,4260	28,4750	28,5030	28,5210	28,5350
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 1,1					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2374,07	2394,07	2404,37	2411,02	2415,81
Massa específica [kg/m ³]	0,14421	0,28644	0,42815	0,56957	0,71081
Peso molecular de saída [kg/kmol]	28,0940	28,1360	28,1580	28,1720	28,1820
Propriedades dos gases de combustão para razão de equivalência de 1,2					
Pressão [kPa]	101,325	202,65	303,97	405,30	506,63
Temperatura de chama adiabática [K]	2345,24	2356,75	2362,13	2365,42	2367,7
Massa específica [kg/m ³]	0,1438	0,28644	0,42885	0,57114	0,71336
Peso molecular de saída [kg/kmol]	27,6730	27,6970	27,7080	27,7150	27,7190

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na tabela 12 nota-se que o comportamento das propriedades termodinâmicas para a combustão pobre ou para a combustão rica do biodiesel se assemelha ao comportamento das propriedades para a combustão do diesel (Jet-A). Ou seja, a temperatura da chama aumenta e a massa específica reduz.

Em razão das propriedades termodinâmicas do biodiesel de sebo bovino disponibilizadas na tabela 12, a figura 17 mostra o gráfico para comparação dos resultados de variação percentual entre os valores de temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre do biodiesel e a figura 18 mostra essas propriedades no caso da combustão rica.

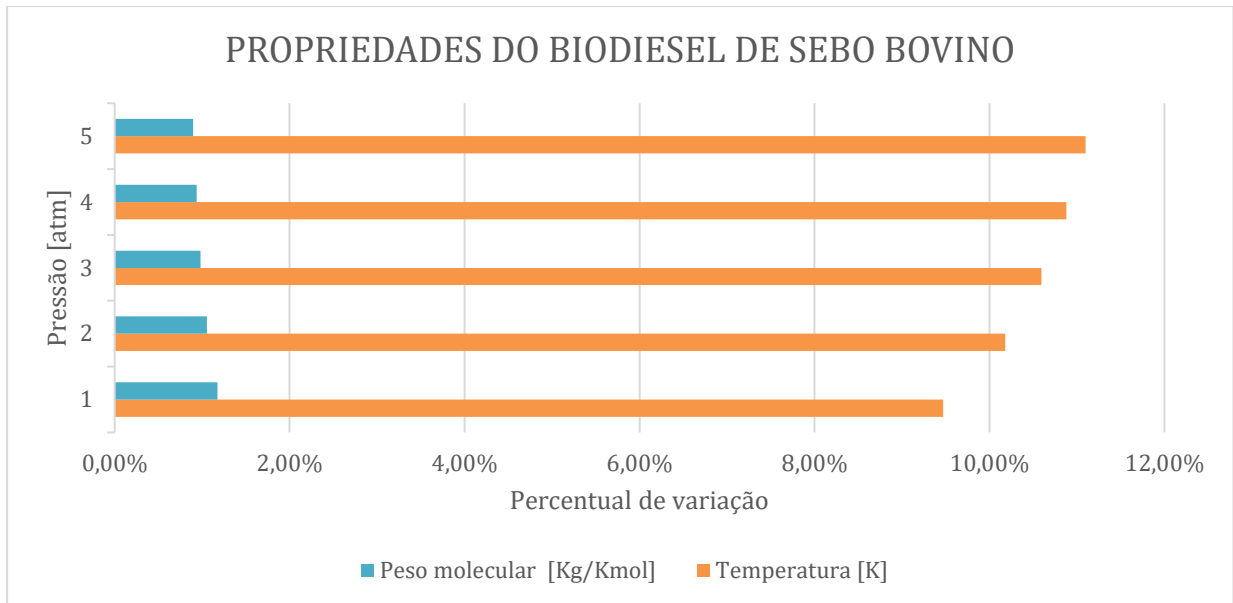


Figura 17. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre ($\phi=0,8$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no biodiesel de sebo bovino. Fonte: Pesquisa direta, 2021.

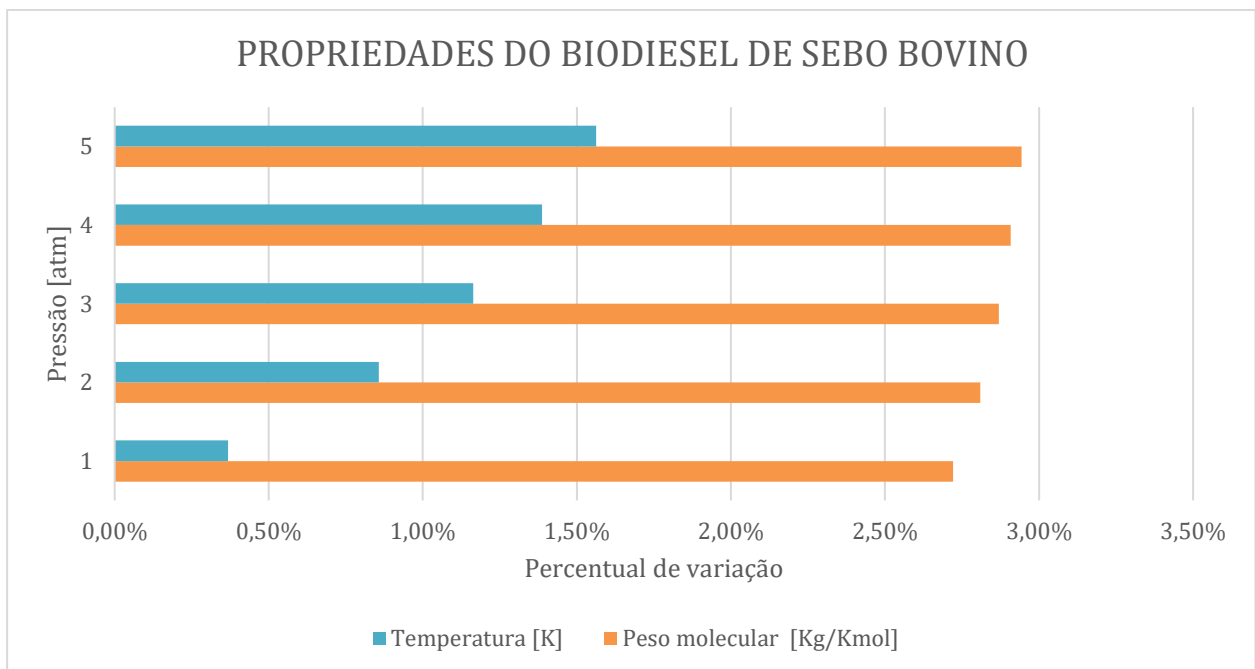


Figura 18. Percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão rica ($\phi=1,2$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) no biodiesel de sebo bovino. Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme a figura 17, a variação percentual do peso molecular de saída apresenta mínima variação dos valores, para o intervalo de pressão de 1 a 5 atm. Então, a variação percentual foi de 1,175% (pressão de 1 atm) a 0,90% (pressão de 5 atm), com uma diferença de apenas 0,275% e da temperatura desde 9,47% (pressão de 1 atm) até 11,10% (pressão de 5 atm), sendo esta crescente e ligeiramente maior.

Observa-se na figura 18 que a variação percentual do peso molecular de saída apresenta valores próximos para o intervalo de pressão de 1 a 5 atm. Logo, a variação percentual foi pequena, desde 2,72% (pressão de 1 atm) a 2,94% (pressão de 5 atm), ou seja, apenas 0,22% de variância. Porém a temperatura apresenta valores crescentes em razão do aumento de pressão, os quais vão de 0,368% (pressão de 1 atm) até 1,56% (pressão de 5 atm).

Finalmente, é feita a comparação gráfica dos dois fluidos da pesquisa: o biodiesel de sebo bovino e o diesel (Jet-A). Na figura 19, observa-se o percentual de variação das propriedades em uma combustão pobre a uma combustão estequiométrica.

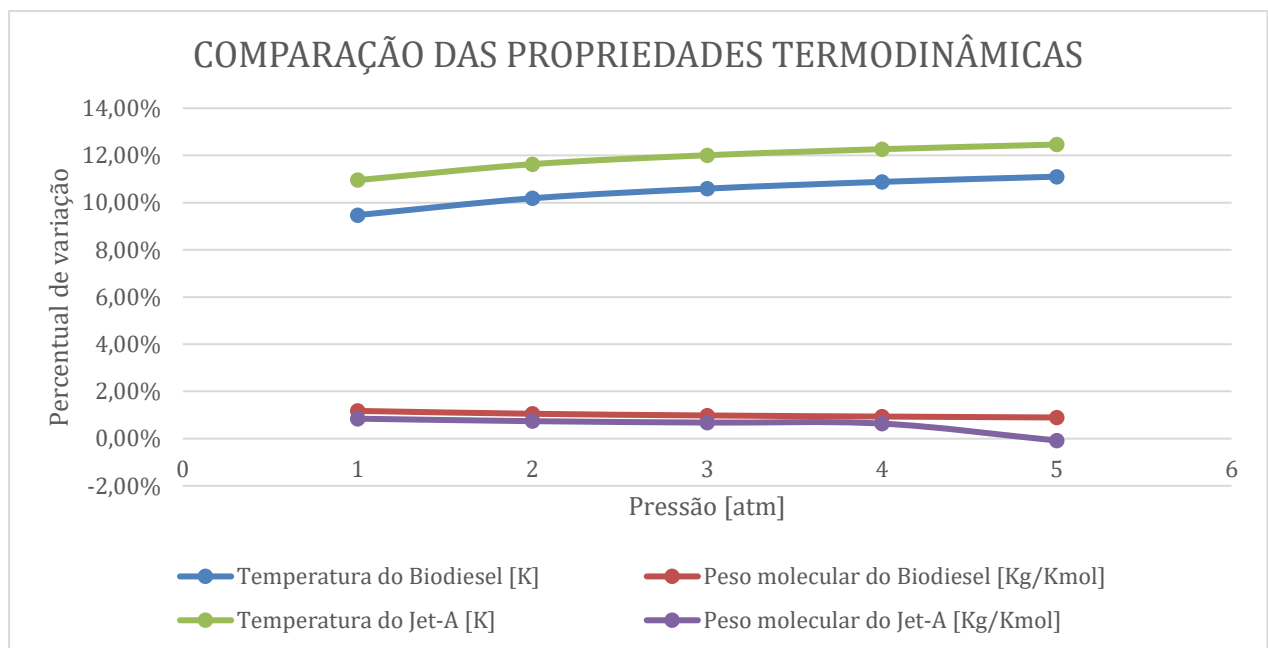


Figura 19. Comparação do percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão pobre ($\phi=0,8$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) dos fluidos biodiesel de sebo bovino e diesel (Jet-A).

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na figura 19 nota-se que nos resultados do percentual de variação há um mesmo comportamento tanto na temperatura quanto no peso molecular do biodiesel de sebo bovino e no Jet-A. Porém, o Jet-A apresenta uma maior variação de temperatura e o biodiesel de peso molecular.

Já a comparação da relação de uma combustão rica e uma combustão estequiométrica está representada na figura 20.

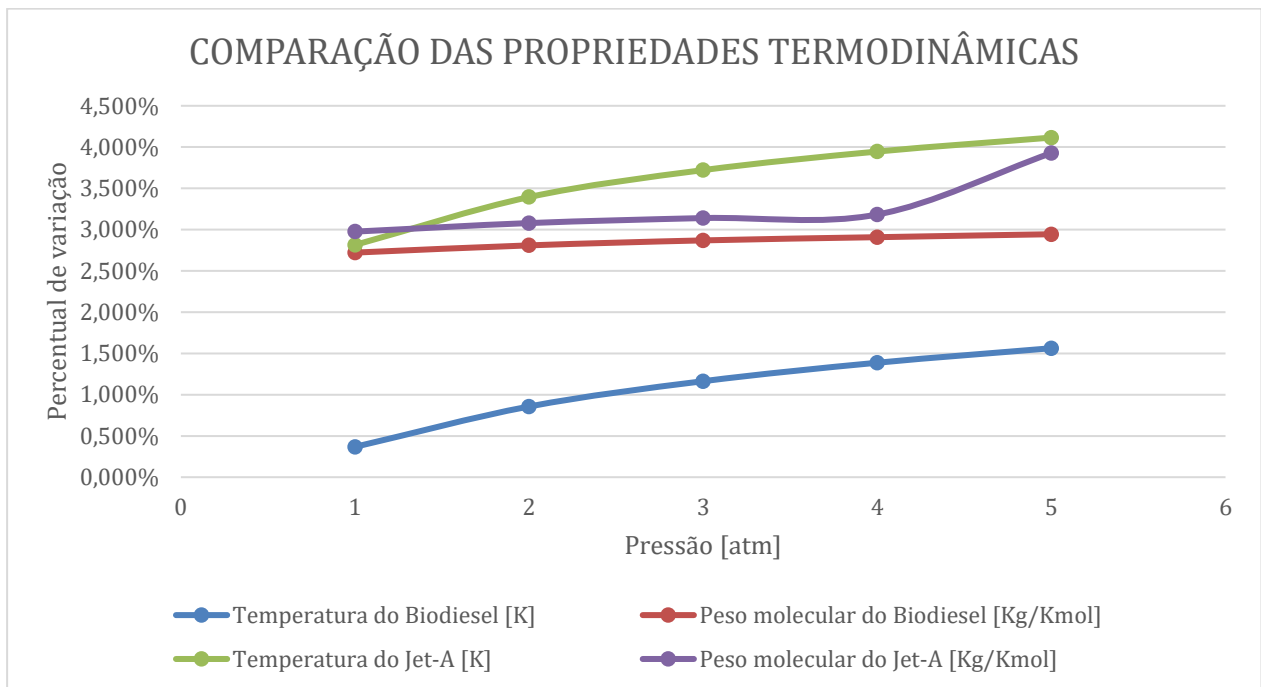


Figura 20. Comparação do percentual de variação das propriedades temperatura e peso molecular de saída em uma combustão rica ($\phi=1,2$) com relação a combustão estequiométrica ($\phi=1,0$) dos fluidos biodiesel de sebo bovino e Jet-A.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Observa-se na figura 20 que a relação do percentual de variação da temperatura em uma combustão rica com relação a uma combustão estequiométrica apresenta uma maior diferença, mas com um comportamento semelhante, já o peso apresenta uma variação pequena com destaque no crescimento dessa no Jet-A quando atinge uma pressão de 5 atm.

4.3. Análise das espécies químicas da combustão no *software CEA*

Uma grande preocupação na atualidade é a emissão de poluentes, a qual só aumentou no decorrer dos anos e afeta diretamente o meio ambiente e a qualidade de vida. Com o objetivo da redução de emissões, esse trabalho visa um meio de substituição de combustíveis fósseis por alternativos.

A utilização do biodiesel de sebo bovino como combustível alternativo é viável e reduziria a emissão desses poluentes na natureza. Então, o *software CEA* foi usado, a fim de simular os possíveis produtos de sua combustão.

O *software* quando executado, além de fornecer as propriedades termodinâmicas descritas na seção anterior, também fornece as frações molares para as interações requeridas. Os dados de saída apresentam os principais produtos da reação: monóxido de carbono, dióxido de carbono, água, hidrogênio, óxido de nitrogênio, nitrogênio, hidróxido e oxigênio. A formação de outros produtos é considerada, mas esses apresentam frações molares muito pequenas, menores que 0,005 para as condições determinadas.

Logo, para análise e compreensão das melhores condições para a realização da combustão, os resultados das frações molares das espécies químicas poluentes foram colocados no gráfico em função da razão de equivalência, variando a pressão.

Sabe-se que o parâmetro razão de equivalência (ϕ) se refere a quantidade de oxigênio utilizado na reação pela quantidade de oxigênio na reação estequiométrica e para valores abaixo de 1 significa que há uma maior quantidade de oxidante do que a quantidade de oxigênio para a reação estequiométrica.

A figura 21 mostra os resultados teóricos da fração molar em função da razão de equivalência para pressão de operação de 1 atm (101,325 kPa), 2 atm (202,65 kPa) e 3 atm (303,97 kPa), 4 atm (405,3 kPa) e 5 atm (506,63 kPa) para espécies químicas poluentes resultantes da combustão do biodiesel de sebo bovino.

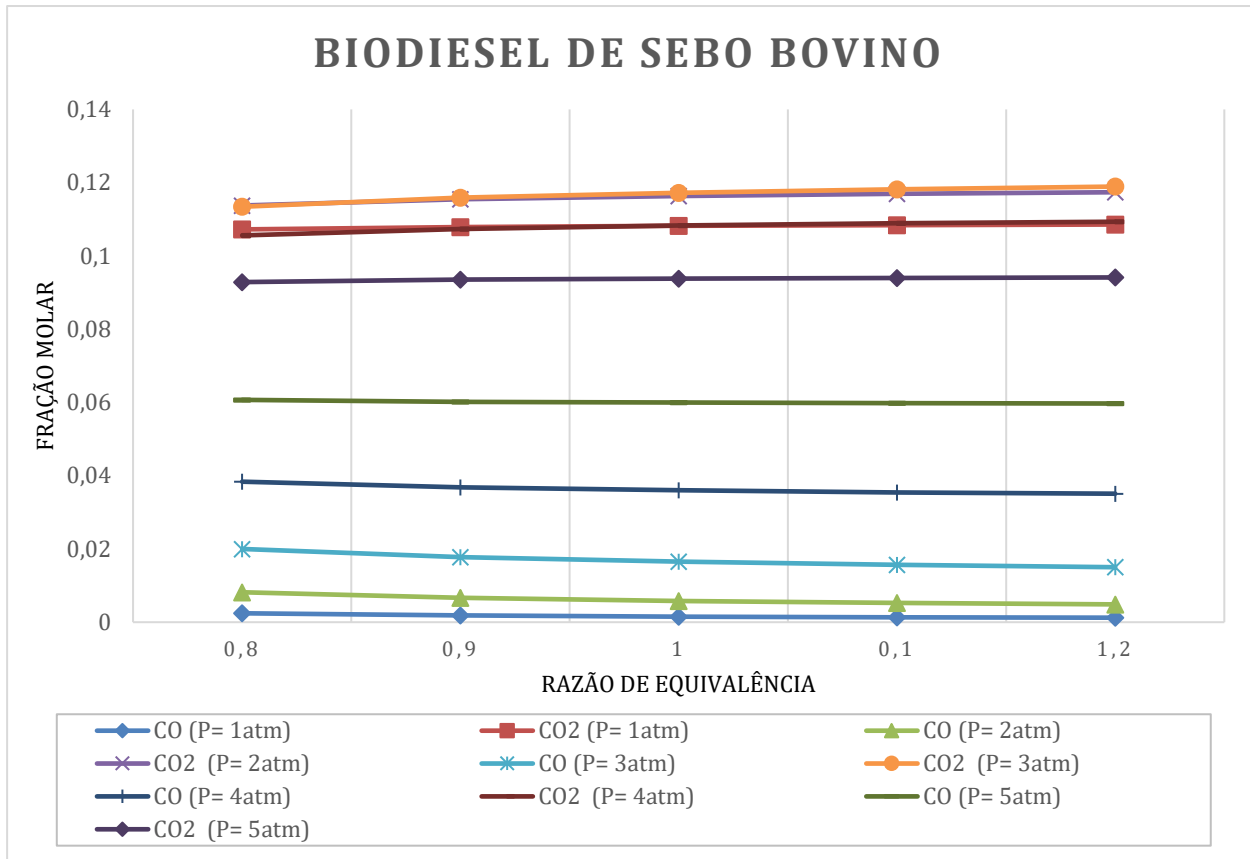


Figura 21. Resultados teóricos da fração molar em função da razão de equivalência para pressão de operação de 1 a 5 atm (101,325 kPa a 506,63 kPa) para as espécies CO e CO₂.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Observa-se na figura 21 apenas as espécies CO e CO₂, os quais juntamente com o MP e NO_x são os agravantes de diversos problemas ambientais. Quanto ao seu comportamento, conforme a pressão aumenta sua fração molar também aumenta, porém os maiores valores apresentados são do CO₂ em 2 atm e 3 atm para todos os valores da razão de equivalência. Portanto, há um aumento dessas espécies devido à pressão, mas as frações molares resultantes possuem valores muito pequenos.

4.4. Análise do comportamento do motor usando o software *Diesel-RK*

No software *Diesel-RK* são feitas as simulações do comportamento do motor utilizando os combustíveis Diesel nº 2 (D100), Biodiesel SME B100, Mistura B40D60 e Mistura B20D80. Esses já estão presentes na biblioteca de combustíveis. Em sequência, são analisados as emissões e os parâmetros de operação do motor. O tutorial está no Apêndice 2.

A simulação resulta na tabela de parâmetros integrais do motor (*Engine Parameters*), a taxa de liberação de calor (*Fuel Injection and Heat Release*) e a injeção de combustível (*Fuel*

Spray visualization). Primeiramente, para a análise do comportamento dos combustíveis injetados no motor, os principais parâmetros disponibilizados são de eficiência e potência, de combustão e ecológicos, uma vez que a pesquisa é voltada a sustentabilidade. Logo, o *software* disponibiliza os resultados dispostos na tabela 13 para comparação.

Tabela 13. Parâmetros de eficiência e potência resultantes do *software Diesel-RK*.

Parâmetros de eficiência e potência		Diesel D100	Biodiesel SME B100	Mistura B40D60	Mistura B20D80
Velocidade do motor [rpm]	RPM	2000	2000	2000	2000
Potência do motor [kW]	P_eng	73,812	65,662	71,91	72,735
Pressão média efetiva [kPa]	BMEP	1174,8	1043,9	1154,1	1163,4
Torque [N m]	Torque	1784,4	313,53	343,37	347,31
Massa de combustível fornecida por ciclo [g]	m_f	0,04443	0,05113	0,04656	0,04534
Consumo específico de combustível [kg/kWh]	SFC	0,2167	0,28033	0,23308	0,22442
Eficiência do motor	Eta_f	0,3909	0,35456	0,3872	0,38954
Pressão média efetiva indicada [kPa]	IMEP	1345,9	1200,6	1328,4	1339,9
Eficiência indicada	Eta_i	0,44784	0,40732	0,44943	0,45088
Velocidade média do pistão [m/s]	Sp	5,333	5,3333	5,3333	5,3333
Pressão média efetiva de atrito [kPa]	FMEP	142,14	135,62	146,62	146,00
Eficiência mecânica	Eta_m	0,892	0,885	0,887	0,888

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

A tabela 13 remete aos resultados da simulação dos combustíveis Diesel D100, Biodiesel SME B100, Mistura B40D60 e Mistura B20D80 com o intuito de compará-los e confirmar qual oferece as melhores condições dentro do motor diesel. A potência do motor usando o diesel é reduzida em 11% quando o B100 é utilizado, porém permanece acima de 71 kW para o B40 e o B20. Já a pressão média efetiva (BMEP) não apresenta grandes alterações para o D100 e as misturas, sendo de 1174,8 kPa (D100), 1154,1 kPa (B40) e 1163,4 kPa (B20), portanto seu desempenho permanece alto e no caso do B100, nota-se uma redução percentual de 11,14% em relação ao diesel. Além disso, a eficiência do motor e eficiência indicada apresentam uma queda de aproximadamente 9% para o biodiesel, o que é significativo, uma vez que 1% de eficiência com ganho ou perda é bastante para o equipamento desenvolvido. A pressão média efetiva indicada (IMEP) também reduz 4,58% (B100) e aumenta 3,16% (B40) e 2,77% (B20) quando comparado ao D100. Enquanto isso, a eficiência mecânica varia 0,82% (B100), 0,60% (B40) e 0,49% (B20) para os biocombustíveis comparados ao diesel. A massa de combustível fornecida por ciclo é 15% maior com o uso do biodiesel. A velocidade média do pistão é constante para o diesel e para as variações de biodiesel, com 5,333 m/s. A pressão média efetiva de atrito também é reduzida 4,58%

para o B100 e o torque tem uma perda de mais de 1000 N.m, o que são pontos negativos do uso do biocombustível no motor. Para complementar a análise, especificamente os parâmetros de potência do motor, torque e consumo específico de combustível para os combustíveis simulados, estão dispostos na figura 22.

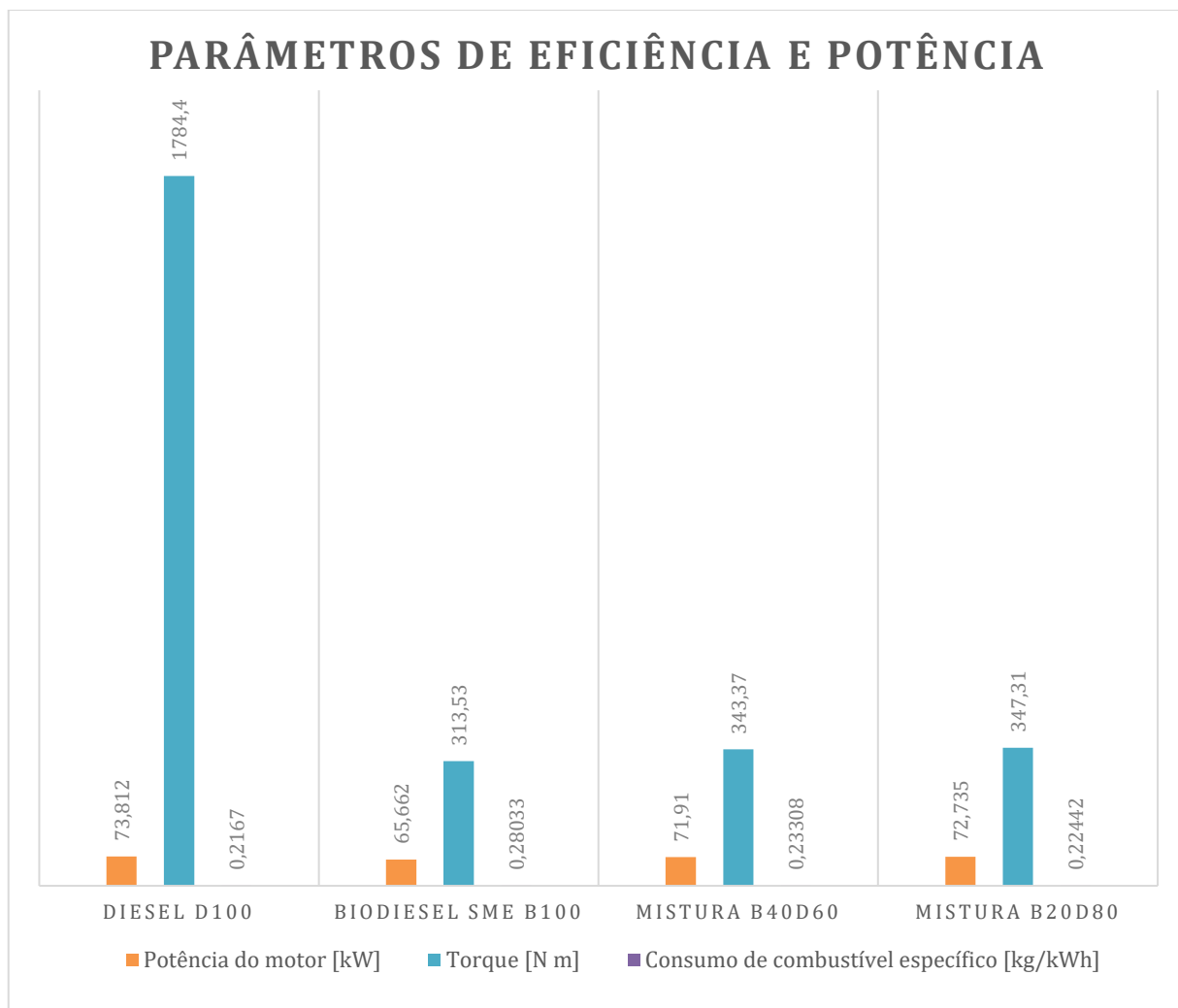


Figura 22. Comparação dos parâmetros de eficiência e potência dos combustíveis Diesel D100, Biodiesel SME B100, Mistura B40D60 e Mistura B20D80.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Como mostra a figura 22, a maior potência do motor é vista no D100 seguido por B20D80, B40D60 e B100 respectivamente. Em relação ao torque, os valores das misturas B40 e B20 são muito próximos, porém com a diminuição percentual de aproximadamente 80% do valor conseguido pelo D100, com 343,37 N.m, 347,31 N.m e 1784,4 N.m. Os consumos específicos dos quatro combustíveis possuem valores semelhantes, próximos a 0,2 kg/kWh. O *software Diesel-RK* disponibiliza também parâmetros da combustão após a sua simulação, descrito na tabela 14.

Tabela 14. Parâmetros de combustão resultantes do *software Diesel-RK*.

Combustão		Diesel D100	Biodiesel B100	Mistura B40D60	Mistura B20D80
Relação de equivalência ar-combustível no cilindro (Lambda)	A/F_eq	2	2	2	2
Pressão máxima no cilindro [kPa]	p_max	11227	9342,7	13436	13336
Temperatura máxima no cilindro [K]	T_max	1742	1480,9	1837,1	1835
Pressão de injeção [kPa]	p_inj.max	98974	108460	351630	343680
Diâmetro de Sauter das gotas [micron]	SMD	10,054	11,588	6,619	6,427
Início da injeção ou tempo de ignição [° CA]	SOI	10	10	10	10
Duração da injeção [° CA]	Phi_inj	30,652	32,801	15,558	15,413
Período de atraso da ignição [°]	Phi_ign	5,7982	1,528	3,6611	4,2174
Início da combustão [° PMS]	SOC	4,2018	8,4756	5,7546	5,7826
Fração da massa de combustível evaporada durante a ignição	x_e.id	0,06331	0,00023994	0,12427	0,18024
Duração da combustão [°]	Phi_z	48,4	117	43,2	44,6
	Phi_z 5%	2,8	6,0	1,6	1,6
	Phi_z 50%	16,8	29,4	11,0	10,6
	Phi_z 95%	33,8	72,2	26,6	26,8

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na tabela 14 tem-se que o *lambda* no cilindro é constante na combustão de todos os combustíveis e a pressão máxima no cilindro sofre uma redução do B100 ao D100, de 11227 a 9342,7 kPa, isto é, 16%. Porém nas misturas B40D60 e B20D80 esse parâmetro ultrapassa o D100 chegando a um aumento percentual de 19,67% e 18,78% respectivamente. O comportamento observado na temperatura máxima do cilindro é contrário, em que há um acréscimo que vai para 1837,1 K (5,45%) e 1835 K (5,33%), entretanto no caso do B100, reduz a 1480,9 K (14,98%). Em relação a pressão de injeção, tem-se um aumento ao substituir o diesel pelo biodiesel puro, além disso a mistura segue esse padrão, isto é, o B40D60 apresenta a maior pressão com 351630 kPa seguido pelo B20D80 com 343680 kPa. O tempo de ignição do diesel é igual aos biocombustíveis, ou seja, apresentam valores idênticos. O período de atraso de ignição sofre uma redução de aproximadamente 73,73%, isto é, de 5,7982° (D100) a 1,5228° (B100), e para a mistura que contém mais diesel (B20) a redução é menor (~27%), de 4,2174° (B20) e para a outra (~36%) de 3,6611° (B40). Outro parâmetro é o aumento no início da combustão com 4,2018° a 8,4756° PMS (101,7%), no caso do D100 e B100, mas se mantém por volta de 5° PMS para as misturas.

No caso da duração da combustão, o *software* disponibiliza um parâmetro, destacado em azul na tabela, para comparação e melhor entendimento. Para o D100, tem-se que $\Phi_z = 48,4^\circ$,

para o B100, $\text{Phi}_z = 117^\circ$ e para as misturas B40D60 e B20D80 valores próximos, de $43,2^\circ$ e $44,6^\circ$. Logo, o biodiesel ultrapassa os limites estipulados pelo *software*, porém existe a possibilidade de ajustes.

Vale ressaltar que um dos parâmetros mais importantes para a injeção de combustível em uma câmara de combustão é o diâmetro médio de Sauter (SMD), uma vez que tem influência direta sobre como as gotas se espalharão após a atomização. Se forem grandes, o tempo de evaporação poderá ser longo, o que também prejudica o processo. Na situação, as misturas B40D60 e B20D80 apresentam os menores valores, com 6,6189 e 6,427 micron, respectivamente. Por outro lado, o B100 possui o maior diâmetro, com 11,588 micron, seguido pelo D100, com 10,054 micron.

A fim de analisar as emissões da combustão no motor, visando a sustentabilidade e a importância do combustível alternativo, o *software* também tem como resultado parâmetros ecológicos como mostra a tabela 15.

Tabela 15. Parâmetros ecológicos resultantes do software Diesel-RK.

Parâmetros ecológicos		Diesel D100	Biodiesel B100	Mistura B40D60	Mistura B20D80
Emissões de particulados Hartridge	Hartridge	5,9358	28,359	5,4266	5,6136
Número de particulados Bosch	Bosch	0,6510	2,6373	0,5950	0,6155
Emissão de particulados [g/kWh]	MP	0,1255	0,8715	0,1148	0,1184
Emissão de dióxido de carbono [g/kWh]	CO ₂	698,24	802,9	716,24	706,18
Fração de NOx no gás de exaustão [ppm]	NO _x	839,94	482,6	1629,9	1534,8
Emissão SO ₂ [g/kWh]	SO ₂	0,00867	0,02804	0,0097	0,00471

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme a tabela 15, os parâmetros ecológicos disponibilizados pelo *software* para os combustíveis D100, B100, B40D60 e B20D80 são as emissões de particulados Hartridge, o número de particulados Bosch, emissão de particulados (MP), emissão específica de dióxido de carbono (CO₂), fração de NOx no gás de exaustão e emissão específica de SO₂. Nota-se que as emissões de dióxido de carbono e de óxidos nítricos são as mais elevadas e também os principais agravantes que trazem malefícios ao meio ambiente e ocasionam sérias consequências.

Sabe-se que as emissões de NOx resultantes das misturas do biodiesel quando comparadas ao diesel convencional, mostra um aumento dessas emissões. Porém, ao analisar as emissões resultantes da simulação, nota-se que o NOx do B100 é reduzido 57,5% do D100, e no caso das misturas há um aumento da fração de até 194%, chegando a 1629,9 ppm (B40).

Quanto ao outro grande poluente, o material particulado (MP) mostra um pequeno decréscimo para o B40D60 e B20D80, sendo eles próximos a 0,11 g/kWh, isto é, uma vantagem sobre os demais combustíveis. Além disso, nota-se que a emissão de dióxido de enxofre (SO₂) é mínima para todos os combustíveis. Para análise das emissões de particulados de Hartridge e do número de particulado de Bosch é gerado o gráfico da figura 23 em função da pressão média efetiva, uma vez que essa influência na eficiência e no desempenho do motor.

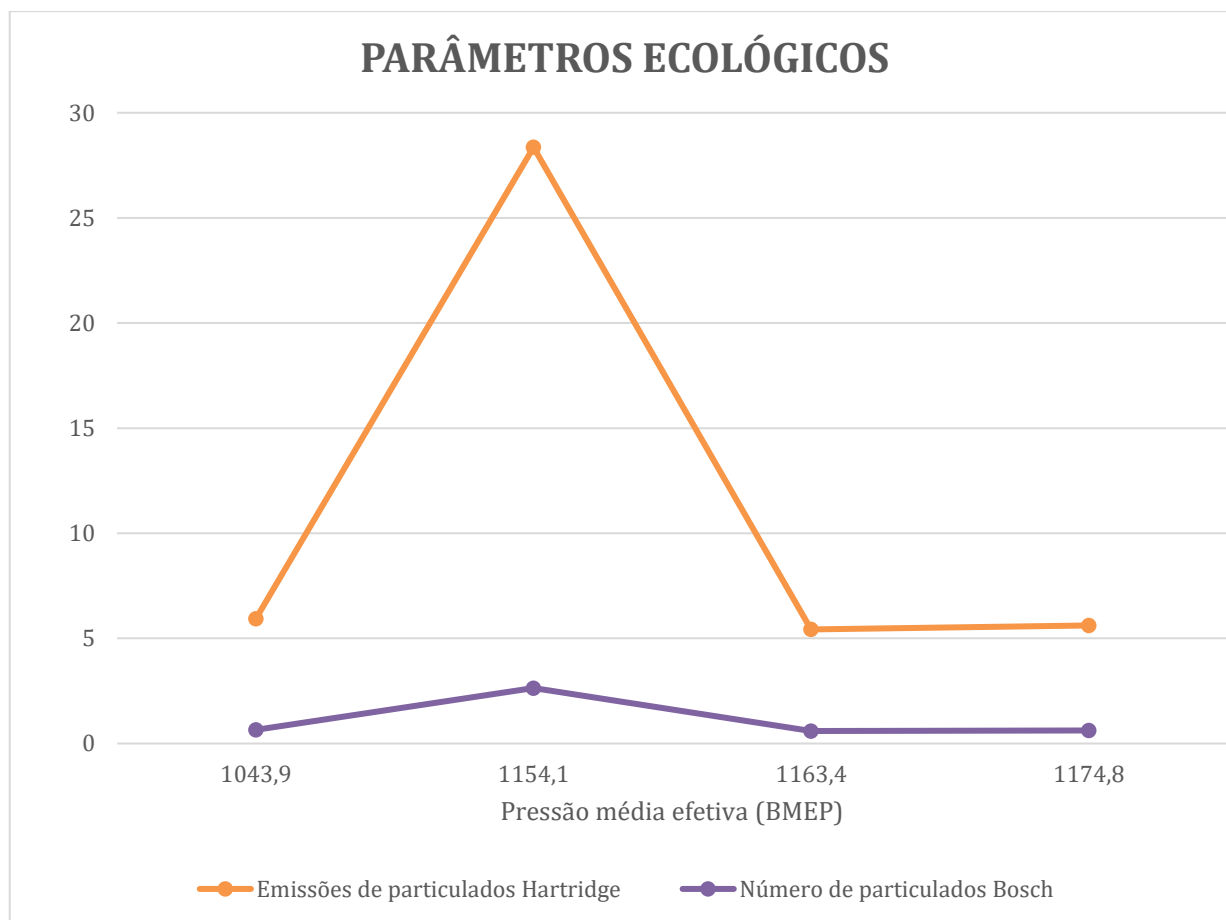


Figura 23. Influência da pressão média efetiva sobre as emissões de particulados de Hartridge e o número de particulados de Bosch.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Como mostra a figura 23, a pressão média efetiva possui influência nas emissões de particulados de Hartridge e no número de particulados de Bosch como pode ser observado na figura 26. Nota-se que do D100, quando na pressão de 1043,9 kPa, para o B100, quando na pressão de 1154,1 kPa, há um pico de Hartridge chegando a 28,359, assim como um aumento para Bosch, a 2,6373. Porém, logo surge um decréscimo ao relacionar o combustível B40D60 com a BMEP de 1163,4 kPa e em seguida, uma certa estabilidade na relação B20D80 com a pressão média 1174,8 kPa. O comportamento é explicado pelo conhecimento anterior, de que Hartridge diz respeito a

densidade das emissões de particulados, ou seja, encontra-se uma utilização particular no campo automóvel para medir a densidade da emissão de particulados dos escapes dos veículos e também de outros. Já a diferença do número de Bosch para Hartridge é que esse avalia exclusivamente a quantidade de carbono das emissões.

Os resultados disponibilizados pelo *software Diesel-RK* sobre a taxa de liberação de calor (*Fuel Injection and Heat Release*) são dados em gráficos para todos os combustíveis simulados. Então, para o D100 tem-se a figura 24.

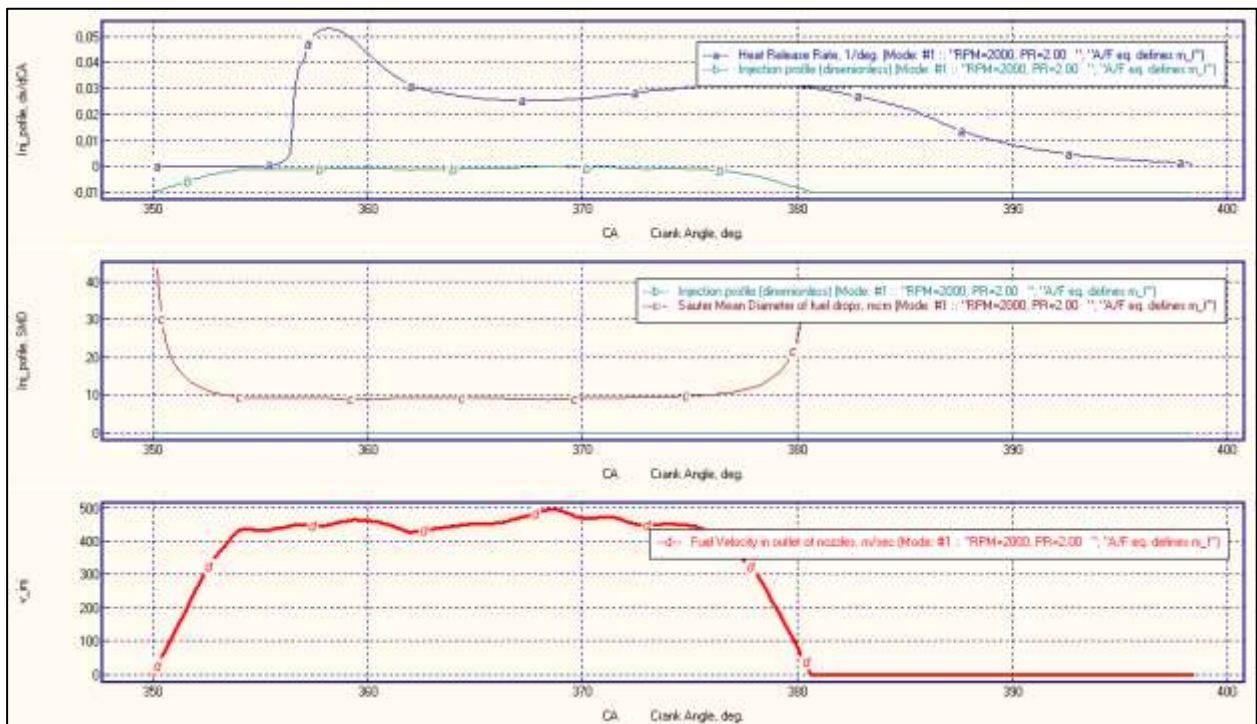


Figura 24. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Diesel n° 2 (D100) em relação ao ângulo no virabrequim. Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Observa-se na figura 24, no primeiro gráfico que a taxa de liberação de calor forma um pico com 0,05 l/° quando o ângulo de manivela se aproxima de 360°, porém logo decresce novamente. Já o perfil de injeção só volta a reduzir, ou seja, a ser negativo, quando esse atinge 380°. O segundo gráfico contém o SMD, o qual atinge seus valores máximos, maiores que 40 micron quando o ângulo de manivela está no 350° e 380°, e se mantém constante, com 10 micron dentro desse intervalo. Em relação a velocidade do combustível na saída nota-se que há um crescimento com certa variação até atingir 380°, atingindo o máximo de 500 m/s e depois volta a zero.

Com intuito de comparação, a figura 25 mostra os gráficos resultantes do Biodiesel B100.

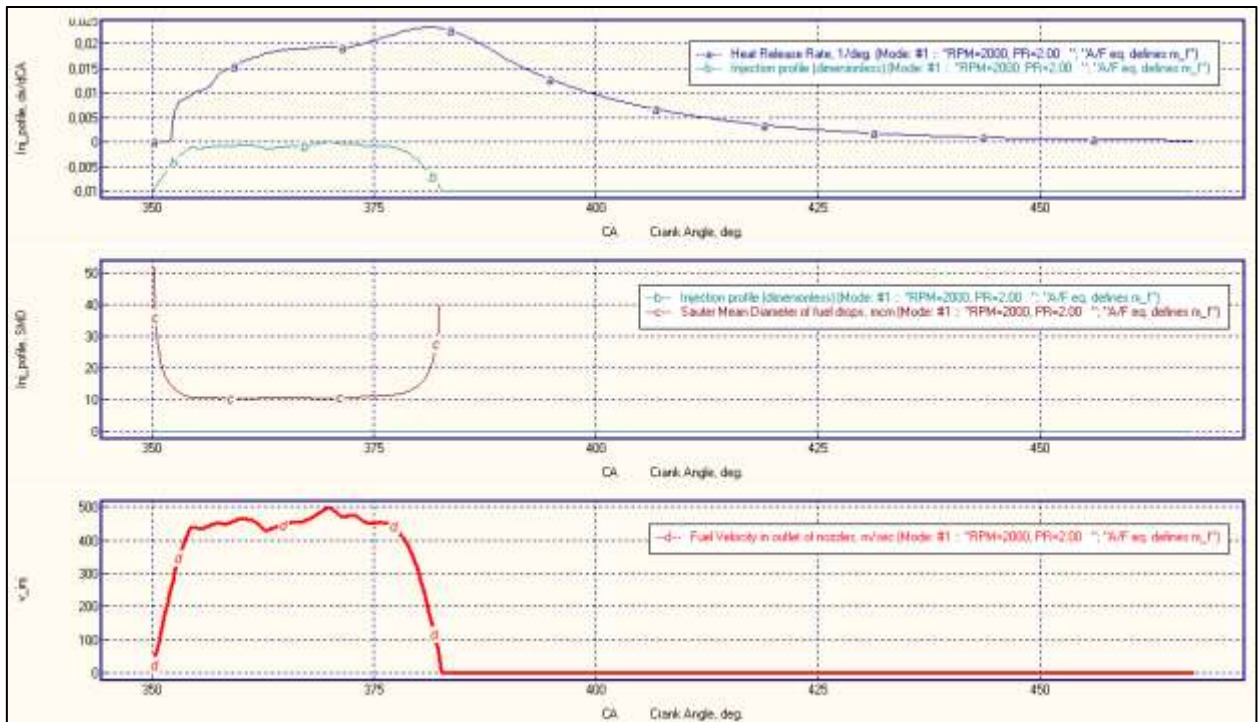


Figura 25. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Biodiesel SME B100 em relação ao ângulo no virabrequim.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na figura 25 nota-se que o Biodiesel B100 apresenta uma maior variação em relação ao D100, nele a taxa de liberação de calor aumenta quando o ângulo de manivela ultrapassa 350°, chegando a 0,025 l/° e só decresce após atingir o pico com o ângulo de aproximadamente 380°. Em relação ao perfil de injeção, esse possui uma variação negativa apenas entre 350° e aproximadamente 380°. O gráfico do SMD é semelhante ao do D100, esse atinge seu valor máximo de 50 microns quando o ângulo de manivela está no 350° e tem seu vale (10 microns) assim que esse ângulo aumenta. Por outro lado, a velocidade do combustível na saída apresenta variações entre 400 e 500 m/s até atingir 375° e depois volta a cair até zerar.

A figura 26 mostra os parâmetros selecionados para a mistura B40D60 e a figura 27 mostra os parâmetros para o combustível B20D80.

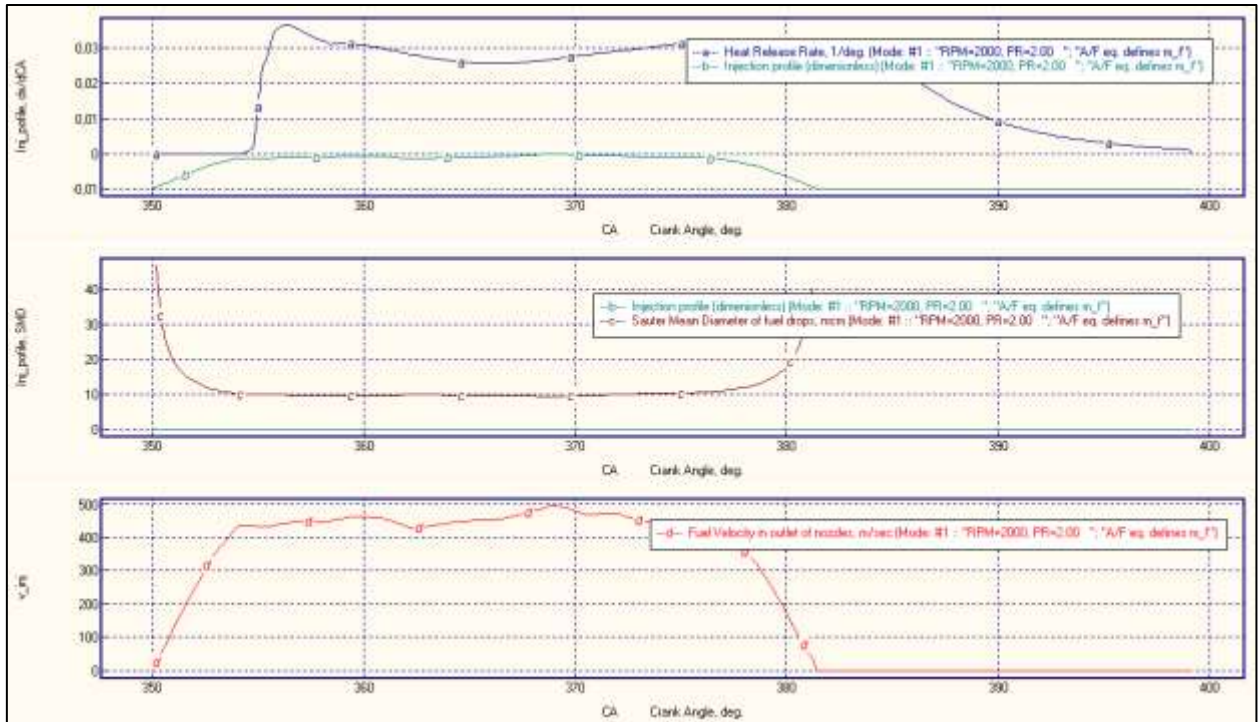


Figura 26. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Biodiesel SME B40D60 em relação ao ângulo no virabrequim.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

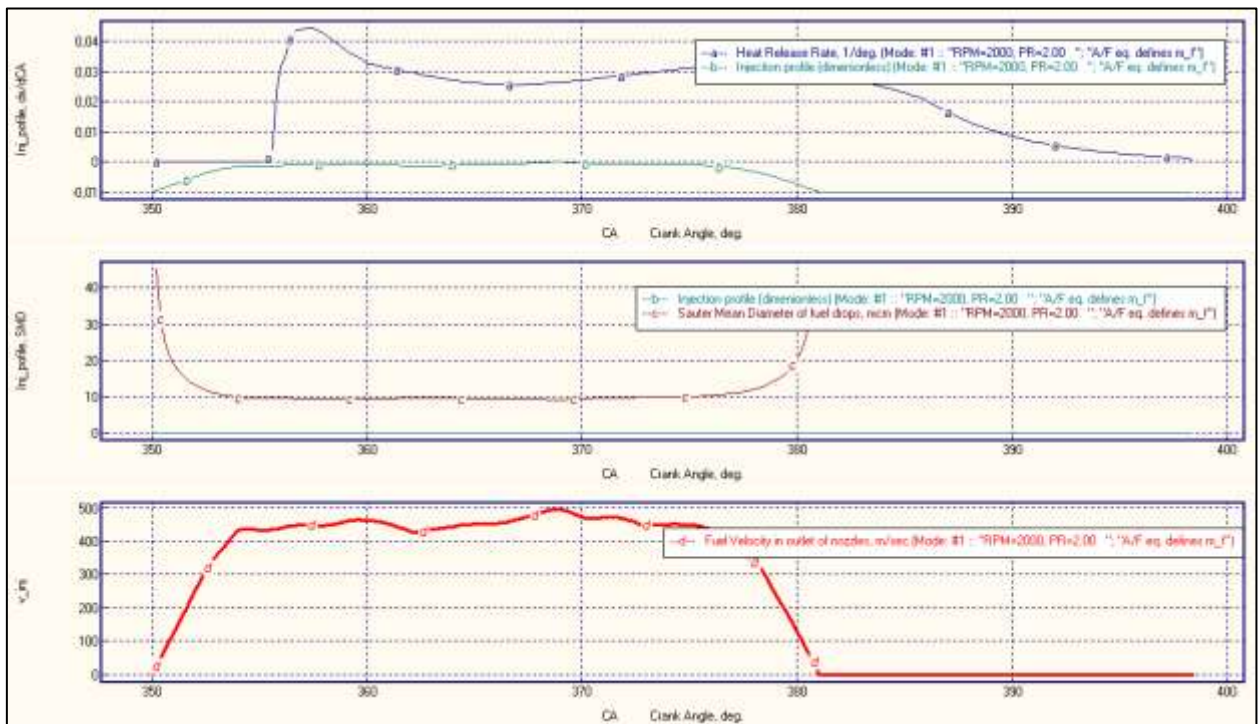


Figura 27. Parâmetros da taxa de liberação de calor, perfil de injeção, diâmetro de Sauter e velocidade do combustível na saída para o Biodiesel SME B20D80 em relação ao ângulo no virabrequim.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme a figura 26, a mistura B40D60 possui uma maior variação quando comparada ao D100 e ao B100, a sua taxa de liberação de calor aumenta quando o ângulo de manivela (*Crank*

Angle) ultrapassa 355°, atingindo quase 0,04 l/° e só tende a zero quando se aproxima do ângulo 400°. Um comportamento semelhante pode ser observado no perfil de injeção, o qual se aproxima de zero desde 350° a um pouco mais de 380°. Já o gráfico do SMD, assim como o D100 e o B100, atinge seu valor máximo quando o ângulo de manivela está no 350°, reduz logo em seguida e volta a crescer quando se aproxima de 380°. Quanto a velocidade do combustível na saída, nota-se um grande crescimento a partir do ângulo de manivela de 350° e só zera quando atinge mais de 380°.

Como mostra a figura 27, o Biodiesel SME B20D80 possui uma variação de zero até atingir 355°, a partir desse atinge o seu pico de 0,04 l/° e antes mesmo da 360° volta a cair, quando comparada ao Diesel nº 2, B100 e B40D60, a sua taxa de liberação de calor mostra uma maior constância, mas também retorna a zero antes de 400°. Para o perfil de injeção, a variação em negativo também ocorre desde 350° a um pouco mais de 380°. O comportamento do SMD é semelhante ao D100, B100 e B40D60, com seu valor máximo quando o ângulo de manivela está no 350° e quando ultrapassa 380°. Em comparação com os anteriores, a velocidade do combustível na saída possui uma variação muito próxima, com seu máximo em 500 m/sec.

Os resultados disponibilizados pelo *software Diesel-RK* sobre os parâmetros do cilindro (*in-cylinder parameters*) são dados em gráficos para todos os combustíveis escolhidos. Então tem-se a figura 28 representando os parâmetros de pressão, temperatura e volume do cilindro.

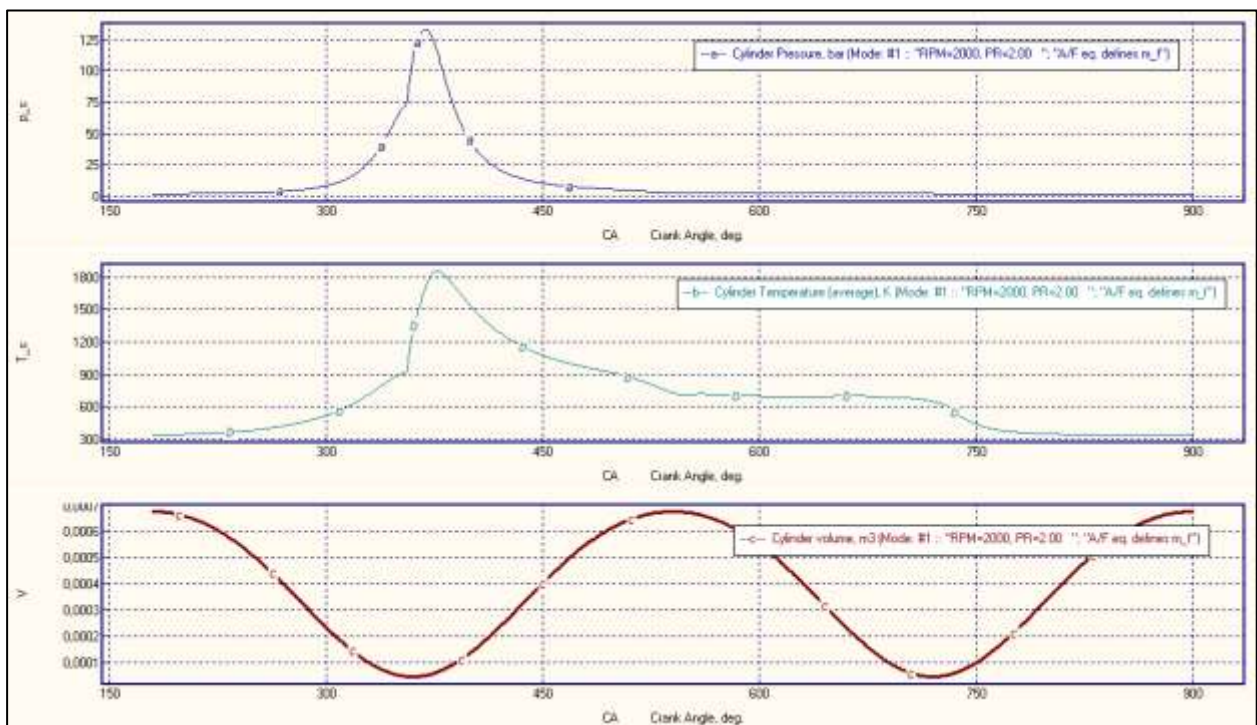


Figura 28. Parâmetros do cilindro: pressão, temperatura e volume para o combustível para o Diesel nº 2 (D100) em relação ao ângulo no virabrequim.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na figura 28, observa-se os parâmetros de pressão do cilindro utilizando o combustível Diesel nº 2, em que ao ultrapassar o ângulo de manivela 300° chega ao seu pico com 125 bar e retorna a zero após atingir 450°. No caso da temperatura do cilindro, o seu máximo é 1800 K quando atinge 400°. Quanto ao volume do cilindro, o seu comportamento é em ondas harmônicas, com o pico em 0,0007 m³.

Ao analisar os gráficos referentes ao D100, B100, B40D60 e B20D80 ficou explícito que os quatro combustíveis possuem os mesmos parâmetros de pressão, temperatura e volume em relação ao cilindro, logo apenas a análise do Diesel nº 2 foi necessária.

O *software Diesel-RK* inclui nos resultados o código "*Fuel Spray Visualization*". Este código permite a animação os resultados da modelação da interação do *spray* de combustível com as paredes da câmara de combustão, o redemoinho de ar e com os *sprays* vizinhos. O código ajuda a escolher a melhor forma da taça do pistão e a seleccionar o diâmetro, o número e as direções dos bicos injetores para uma determinada duração de injeção e intensidade do redemoinho, sendo disponibilizada como imagem plana e 3D. Na figura 29 nota-se a visualização do *spray* do combustível B100, isto é, a forma da cabeça do pistão e a evolução dos *sprays* do combustível do motor.

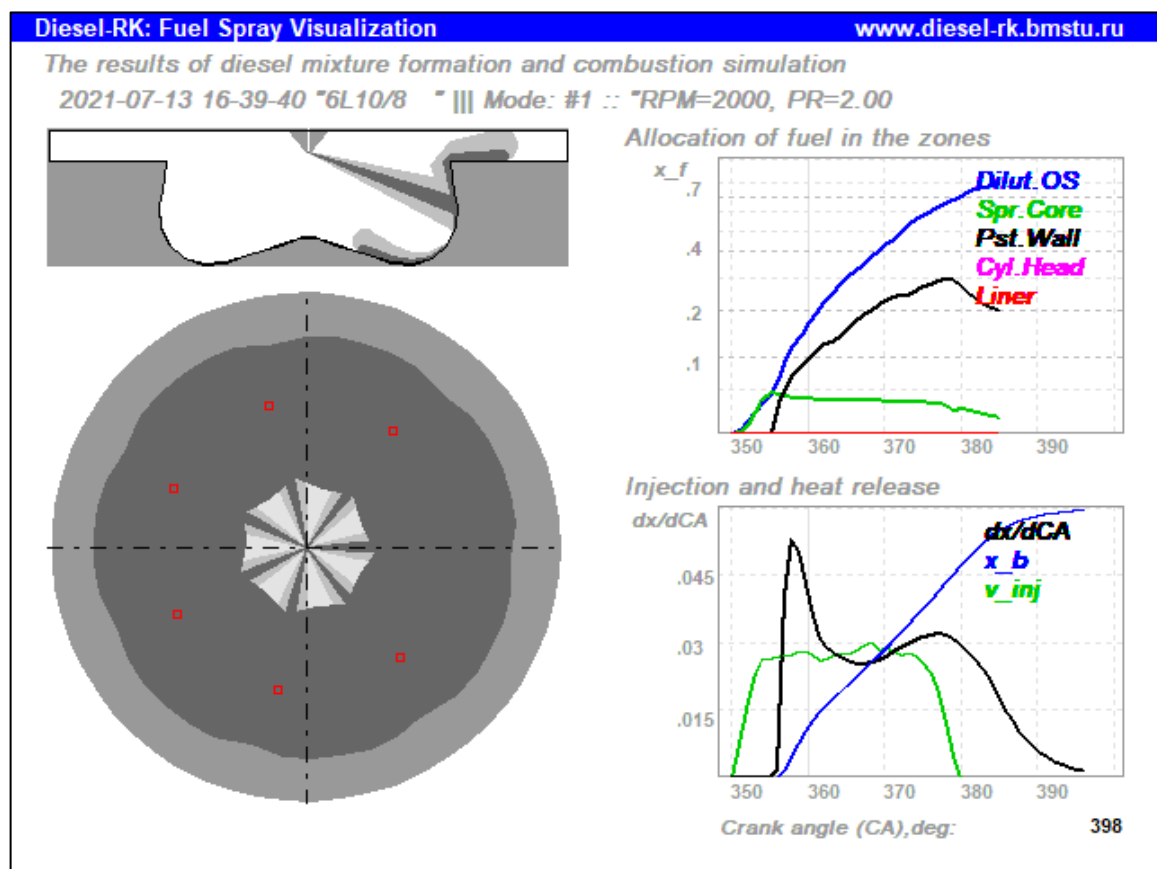


Figura 29. Visualização do spray do combustível B100.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

A visualização do *spray* do combustível B100 exposta na figura 29 mostra os resultados da mistura da formação do diesel e da simulação da combustão, destacando a injeção do combustível no formato escolhido. Os gráficos representam a alocação dos combustíveis nas zonas (*allocation of fuel in the zones*), a injeção e a liberação de calor (*injection and heat release*). Esses acompanham a simulação da injeção do combustível e tem-se que:

- Dilut.OS: é uma fração de combustível atribuída em Manga Externa do *spray* e em Arredores de Fluxo Próximo de Parede;
- Spr.Core: é um combustível alocado em Dense Core do *spray* livre;
- Pst.Wall: é uma fração de combustível alocada no Fluxo Próximo de Parede;
- Cyl.Head: é uma fração de combustível depositada na superfície da tampa do cilindro;
- Liner: é uma fração de combustível depositada na superfície da camisa do cilindro.

Quanto as curvas no diagrama de injeção e liberação de calor:

- dx/dCA : é uma taxa de liberação de calor;
- x_b é uma fração de liberação de calor;
- v_{inj} é uma velocidade de injeção.

Ao visualizar os gráficos referentes ao Diesel nº 2, Biodiesel SME B100, B40D60 e B20D80 nota-se um comportamento semelhante entre os combustíveis. Então, apenas a análise do B100 foi necessária.

Além disso, para complementar a análise dos combustíveis dentro do motor e aumentar consideravelmente a eficiência da investigação computacional, proporcionando formas eficazes de melhorar a concepção do motor, o *software Diesel-RK* disponibiliza as ferramentas de otimização.

Para realizar um cálculo de otimização o *software* está equipado com um procedimento integrado de otimização multiparamétrica, multidimensional e também a possibilidade de realizar investigações de pesquisa paramétrica 1D e 2D.

No caso da otimização simultânea de poucos parâmetros do motor: NOx, fuligem e consumo de combustível específico (SFC), a função alvo incluindo a lista de parâmetros do motor pode ser calculada com o Procedimento Definido pelo Utilizador a ser feito como DLL e ligado ao kernel *Diesel-RK* existente.

4.4.1. Otimização do tempo de injeção na potência máxima

Com o intuito de otimizar o tempo de injeção na potência máxima de combustível Biodiesel SME B100, foi selecionado 1D *scanning*: *scanning* => *Radio Button 1D Scanning*. Em seguida,

um argumento para a verificação: Theta_i (Tempo de injeção) e delimitado o mínimo valor igual a 4 graus, o máximo 12 graus e o número de pontos de cálculo igual a 5.

O ângulo de injeção ótimo é escolhido a partir das seguintes considerações:

- A pressão de ciclo máxima para um motor de transporte com BMEP ≈ 16 não deve exceder 170 bar, ou seja, $p_{\text{max}} < 170$ bar;
- O consumo de combustível deve ser SFC mínimo;
- A taxa de aumento de pressão não deve exceder o limite, sendo $dp/d\theta < 6,0 \div 6,5$ bar/°.

Portanto, o ângulo no modo de potência máxima é $\theta_i = 7^\circ$ BTDC. Neste momento de injeção, a potência apresenta a possibilidade de exceder o valor requerido de 129 kW. Nesse caso, para reduzir a potência, é necessário ajustar o fornecimento de combustível cíclico de modo a que a potência calculada corresponde ao valor requerido.

O cálculo do fornecimento cíclico do combustível é feito pela seguinte equação:

$$m_f = 0,118 \times \left(\frac{129}{131} \right) = 0,1162 \text{ [g]} \quad (10)$$

Como resultado da otimização e para uma melhor análise obtém-se a figura 30.

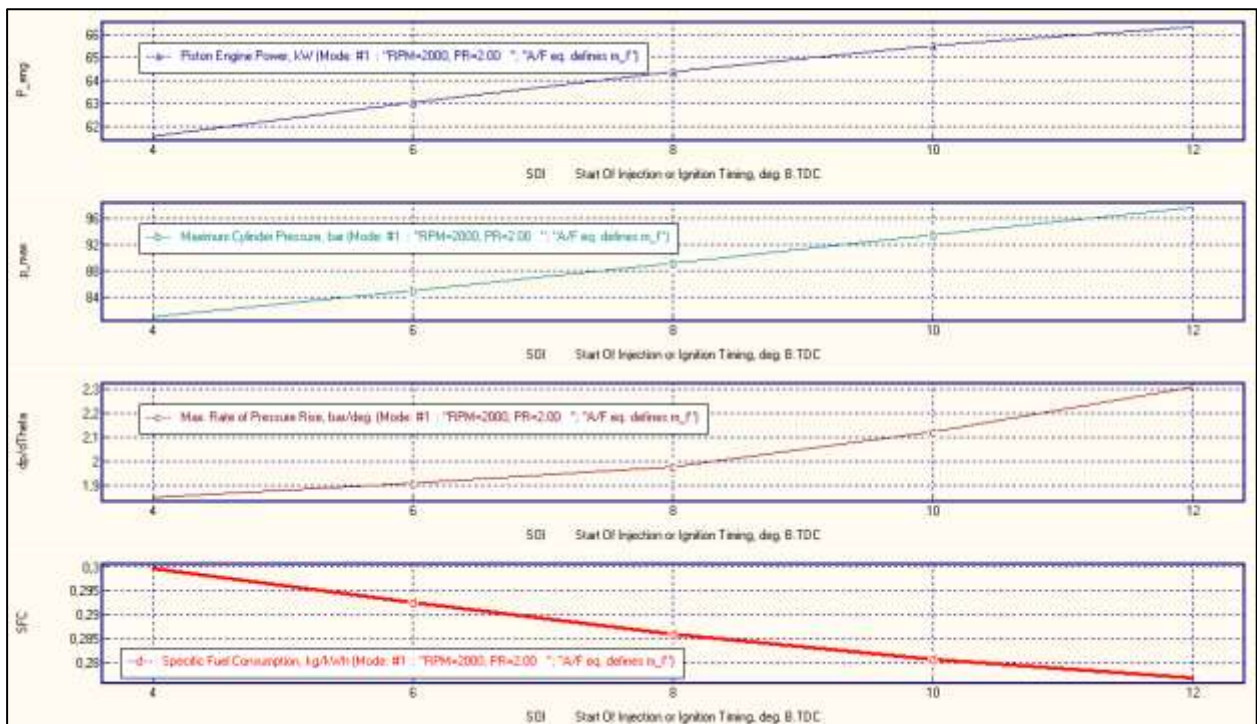


Figura 30. Relação entre a potência efetiva, pressão máxima no cilindro, taxa de aumento de pressão e o consumo específico de combustível na injeção de combustível com potência máxima.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

A figura 30 representa parâmetros da otimização do tempo de injeção na potência máxima, em que foi selecionada a potência efetiva (P_{eng}), a pressão máxima do cilindro (p_{max}), a taxa máxima de aumento da pressão ($dp / d\theta$) e o SFC em relação ao tempo de injeção (θ_i). Portanto, a potência do motor torna-se crescente a partir do tempo de ignição de 4° com 61 kW e atinge o seu máximo no 12° com 67 kW, assim como a pressão máxima do cilindro e taxa máxima de aumento de pressão, que possuem um comportamento gráfico semelhante ao da potência, com seus máximos de 97 bar e $2,3\text{bar}/^\circ$. Por outro lado, o consumo específico de combustível é contrário aos demais, tendo seu pico no tempo de ignição 4° com 0,3 kg/kWh e seu vale no 12° com aproximadamente 0,27 kg/kWh.

4.4.2. Otimização do tempo de injeção de combustível no torque máximo

A otimização do tempo de injeção ainda para o combustível Biodiesel SME B100 no torque máximo é semelhante a forma encontrada na potência máxima, considerando apenas que a pressão máxima do cilindro, o consumo de combustível específico e o torque são plotados. O cálculo para obter o torque máximo é dado por:

$$m_{fT_{max}} = m_{fP_{max}} \times \left(\frac{T_{max}}{T_{p_{max}}} \right) \times 0,97 = 0,1164 \left(\frac{690}{600} \right) \times 0,97 = 0,1298 [g] \quad (11)$$

Em que, o coeficiente 0,97 tem em conta a relação do combustível específico efetivo consumo no modo de binário máximo e no modo de potência máxima; parâmetros T_{max} e P_{max} designam o modo de torque máximo e potência máxima; T é o Torque.

Os motores modernos utilizam normalmente um impulso controlado. Relação de pressão do compressor $PRC_{T_{max}}$ ao regime de torque máximo pode ser calculado como:

$$PRC_{T_{max}} = 0,905 \times PRC_{P_{max}} \quad (12)$$

Onde $PRC_{P_{max}}$ é a relação de pressão do compressor em regime de potência máxima, 0,905 é o empírico coeficiente que muda com base no método de controlo de impulso.

A eficiência do turbo alimentador em regime de torque máximo excede a da potência máxima regime em $1 \div 2\%$. A perda de pressão no escape e na admissão no regime de binário

máximo é metade do que se verifica na potência máxima. A pressão inicial antes de a turbina poder ser regulada como $0,9 PRC_{Tmax}$.

A pressão máxima de injeção neste regime pode ser assumida como a o mesmo que no regime de potência máxima se o motor tiver um sistema de combustível *common rail* instalado.

Consideram-se as seguintes características para escolher o momento ótimo para a injeção de combustível:

- Pressão máxima de ciclo para um motor de transporte com BMEP ≈ 16 não deve exceder 170 bar, isto é, $p_{max} < 170$ bar;
- O consumo de combustível deve ser SFC mínimo;

Além disso, nesse caso, o torque no ponto ótimo é de 697 N m. Para trazer o binário para o nível requerido de 690 N m, a massa de combustível do ciclo m_f deve ser reduzida para:

$$m_{fTmax} = 0,1298 \left(\frac{690}{697} \right) = 0,1285 [g] \quad (13)$$

Portanto, o *software* disponibiliza variados gráficos como resultado e os mais interessantes para a análise da otimização estão representados pela figura 31.

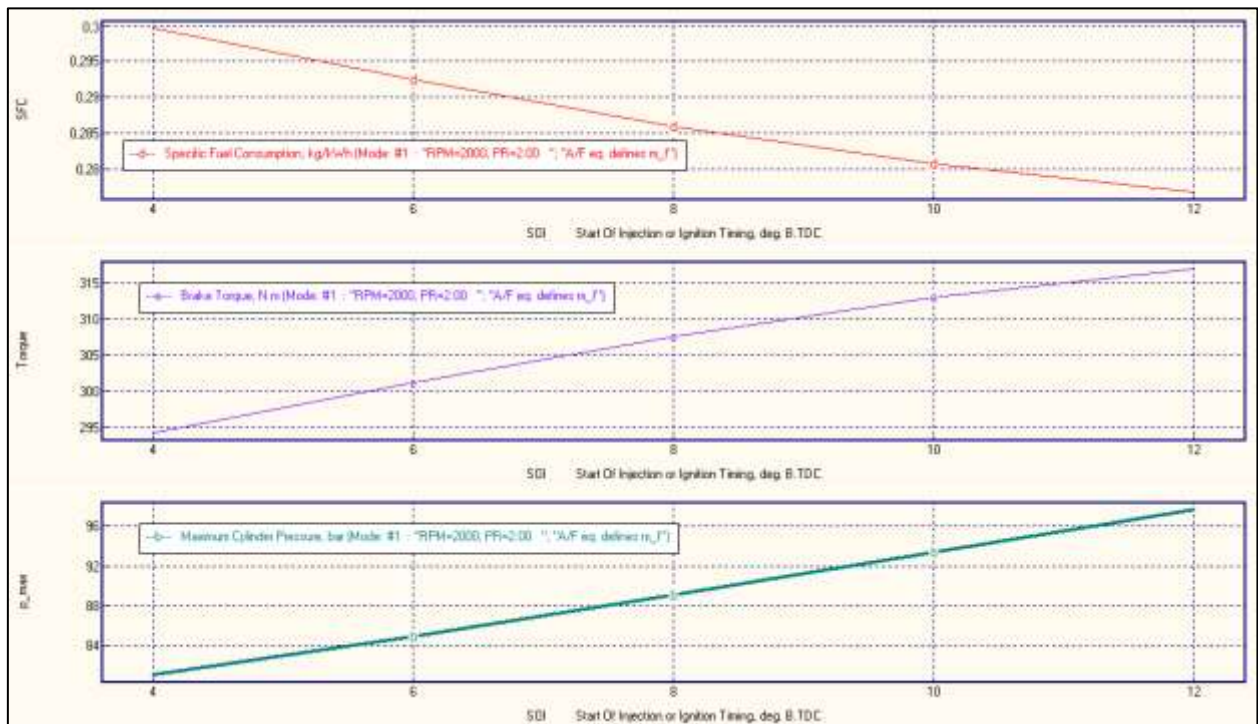


Figura 31. Relação entre o consumo específico de combustível, a máxima pressão do cilindro e o torque no tempo de injeção de combustível no máximo regime de torque.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme figura 31, os parâmetros da otimização do tempo de injeção no máximo regime de torque, selecionados foram o consumo de SFC, a pressão máxima do cilindro (p_{max}) e o torque no tempo de injeção de combustível (Θ_i). Logo, o consumo específico de combustível tem seu máximo a 0,3 kg/kWh no tempo de ignição de 4° e seu mínimo em 12° com aproximadamente 0,27 kg/kWh. Em relação ao torque e a pressão máxima do cilindro ocorre o contrário, seus mínimos são no tempo de injeção de 4° com aproximadamente 294 N m e 82 bar, enquanto seus máximos no 12° atinge um valor superior a 315 N m e 96 bar, respectivamente.

5. CONCLUSÃO

Neste capítulo é fornecida a conclusão acerca do trabalho a partir dos resultados obtidos e relacionadas algumas recomendações de trabalhos futuros.

5.1. Conclusão

No presente trabalho foi realizada uma pesquisa acerca do biodiesel como uma fonte alternativa de combustível utilizada em motores de combustão interna de ignição por compressão. O estudo sobre a sua utilização elucidou a redução de várias das emissões associadas ao diesel, como o MP, CO, HC, entre outros. Portanto, uma alternativa renovável e uma inovação tecnológica com essa solução energética envolve todo um modelo de desenvolvimento. Além disso, foi esclarecido que o biocombustível é uma alternativa plausível de redução do impacto do efeito estufa e quando comparada ao diesel possui diversas vantagens, como maior biodegradabilidade, redução da emissão de gases, maior poder lubrificante, maior ponto de fulgor, entre outros.

A influência da queima do biodiesel em um motor de combustão interna de ignição espontânea e as suas emissões foram analisadas a partir dos *softwares Chemical Equilibrium with Applications* e *Diesel-RK*.

O *software CEA* permitiu a análise da combustão rica, estequiométrica e pobre do biodiesel de sebo bovino e do Jet-A, os quais tiveram as suas propriedades termodinâmicas de pressão, temperatura, massa específica e peso molecular comparadas. Para o Jet-A, nos resultados da combustão pobre a estequiométrica observa-se pouca influência no aumento da temperatura, mesmo aumento na massa específica e pouca variância no peso molecular. No caso da combustão rica, as propriedades apresentam valores decrescentes, e a massa específica com variações mínimas. O comportamento das propriedades do biodiesel se assemelha aos do diesel, ou seja, a temperatura da chama aumenta e a massa específica reduz.

Quanto a comparação dos dois fluidos, há um mesmo comportamento tanto na temperatura quanto no peso molecular, porém uma maior variação de temperatura no Jet-A e do peso molecular no biodiesel (combustão pobre a estequiométrica). Por outro lado, na combustão rica, a relação do percentual de variação da temperatura apresentou maior diferença, em relação ao o peso houve um crescimento para o Jet-A.

Ainda, uma análise das espécies químicas liberadas foi realizada e notou-se que a emissão dos poluentes apresentou um aumento, porém em uma pequena fração molar, portanto, uma vantagem de sua adoção.

O *software Diesel-RK* simulou do comportamento do motor utilizando os combustíveis D100, B100, B40D60 e B20D80, permitindo a análise dos principais parâmetros disponibilizados e posterior otimização.

Dos parâmetros de potência e eficiência concluiu -se que a potência do motor usando o diesel foi reduzida quando utilizado o B100 e permaneceu semelhante para B40 e B20. Já a pressão média efetiva não apresentou grandes alterações para o D100 e as misturas, em vista disso, seu desempenho permanece alto, ao contrário do B100, em que houve uma redução. A eficiência do motor e eficiência indicada apresentaram uma queda significativa para o biodiesel. A pressão média efetiva indicada reduziu para todos os biocombustíveis e torque teve uma grande perda do D100 ao B100.

Da combustão, averiguou-se a constância do lambda para todos os combustíveis, a redução da pressão máxima do cilindro para o B100 e aumento o B40 e B20. A temperatura máxima comportou da mesma forma. O tempo de ignição do diesel foi igual aos biocombustíveis. A duração da combustão ultrapassa o necessário para D100, B100, B40 e B20. O SMD apresentou menores valores para B40 e B20, e maior diâmetro para B100, prejudicando-o.

Dos parâmetros ecológicos, as emissões de dióxido de carbono e de NO_x foram as mais elevadas. Quanto ao outro grande poluente, o MP mostrou decréscimo para o B40 e B20, logo, uma vantagem sobre os demais combustíveis. A emissão de SO₂ foram mínimas para todos os combustíveis.

Por fim, a otimização simultânea de parâmetros do motor foi realizada com potência e torque máximos, melhorando a concepção do motor.

5.2. Recomendações para trabalhos futuros

Como sugestão de trabalhos futuros é viável considerar o estudo sobre redução do NO_x liberado pela combustão do biodiesel, uma vez que esse aumentou em comparação ao uso do diesel. Assim, sugere-se pesquisas sobre o processo de redução catalítica (SCR), com adição de ureia, ou pela recirculação dos gases do motor (EGR), ou ainda pela associação de ambas em um conjunto de filtros.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALMEIDA, G. C. **Metodologia para avaliação do desempenho de câmaras de combustão tubo-anulares a gás flex. com base no parâmetro de carregamento do combustor.** Trabalho de Graduação, UFJF, Juiz de Fora, 2016.

ANEEL. **Programa de Incentivo às Fontes Alternativas.** Disponível em: <https://www.aneel.gov.br/proinfra>. Acesso em 23/06/2021.

ANP – Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Resolução ANP nº 15, de 17.7.2006 -DOU 19.7.2006.** Disponível em: https://www.udop.com.br/download/legislacao/comercializacao/juridico_legiscalcao/res_15_especificacao_diesel_e_mistura.pdf. Acesso em 06/07/2021.

ANP – Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Resolução ANP nº 45, de 25.8.2014 –DOU 26.8.2014.** Disponível em: <http://legislacao.anp.gov.br/?path=legislacao-anp/resol-anp/2014/agosto&item=ranp-45-2014&export=pdf>. Acesso em 21/06/2021.

ANP – Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Biocombustíveis.** Disponível em: <http://www.anp.gov.br/biocombustiveis/biodiesel>. Acesso em 21/06/2021.

ANP – Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Produção de Biocombustíveis.** Disponível em: <http://www.anp.gov.br/producao-de-biocombustiveis>. Acesso em 21/06/2021.

BOHON, M., METZGER, B. A., LINAK, W. P. *Glycerol combustion and emissions. Proceedings of the combustion institute*, 8p, 2010.

BABRAUSKAS, V. *Chapter 4: Ignition of gases and vapors. Ignition Handbook, Fire Science Publishers. Fire Science and Technology Inc. Issaquah, USA, 2003.*

BRITANNICA. *Energy.* Disponível em: <https://www.britannica.com/science/energy>. Acesso em 05/11/2019.

BRITO, N. C. **Estudo das normas sobre emissão de gases poluentes no Brasil e seu impacto na produção empresarial**. Disponível em: <https://jus.com.br/artigos/19061/estudo-das-normas-sobre-emissao-de-gases-poluentes-no-brasil-e-seu-impacto-na-producao-empresarial>. Acesso em 28/10/2019.

BOYCE, M. P. **Gas Turbine Engineering Handbook**. 2ed. Oxford: Gulf Professional Publishing, 2002.

COWARD, H. F., JONES, G. W. *Limits of flammability of gases and vapors*. Bulletin 503, Bureau of Mines, 1952.

DIB, F. H. **Produção de biodiesel a partir de óleo residual reciclado e realização de testes comparativos com outros tipos de biodiesel e proporções de mistura em um moto-gerador**. Dissertação (mestrado em engenharia mecânica). Universidade Estadual Paulista. Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira. 144 f., 2010.

EMBRAPA. **Produção e uso do biodiesel**. Disponível em: <https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/92833/1/Avaliacao-do-programa-nacional-de-producao-e-uso-do-biodiesel.pdf>. Acesso em 06/11/2019.

FENG, T e LÜ, L. **The characteristics of ammonia storage and the development of model-based control for diesel engine urea-SCR system**. Journal of Industrial and Engineering Chemistry, v. 28, p. 97-109, 2015.

FERGUSON, C. R. e KIRKPATRICK, A. T. *Internal Combustion Engines, Applied Thermosciences - 2nd edition*. United States America: John Wiley & Sons, Inc, 2001.

GAMA, A. P. E. **Geração de biodiesel pelos processos de transesterificação e hidroesterificação, uma avaliação econômica**. Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2008.

GLASSMAN, I. *Combustion. Third Edition, Academic Press*, 2001.

GLASSMAN, I., YETTER, R. **Combustion**. 4 ed, Elsevier, 2008.

GIL, A.C. **Como elaborar projetos de pesquisa**. 4. ed. São Paulo: Atlas, 2007.

GIL, A. C. **Como elaborar projetos de pesquisa**. 3. ed. São Paulo: Atlas, 1991.

GOLDEMBERG, J. **Energia para o Desenvolvimento**. São Paulo: T.A. Queiroz Editor Ltda, 1988.

GOLDEMBERG, J. **Energia, Meio Ambiente & Desenvolvimento**. São Paulo: Edusp, 1998.

GOLDEMBERG, J., LUCON, O. **Energias Renováveis: um futuro sustentável**. Revista USP, São Paulo, 2007.

GOLDEMBERG E LUCON. **Energia e meio ambiente no Brasil**. Revista USP, São Paulo, 2007.

GOLDEMBERG E LUCON. **Energias sustentáveis: um futuro sustentável**. Revista USP, São Paulo, 2007.

HEYWOOD, J. B. *Internal Combustion Engine Fundamentals*. Singapore: McGraw-Hill, 1988.

HILSDORF, J. W. **Química Tecnológica**. São Paulo. Pioneira Thomson, 2004.

HOEKMAN S.K. & ROBBINS C. **Review of the effects of biodiesel on NOx emissions**. Fuel Processing Technology, v. 96, p. 237-249, 2012.

KANEM, N. **População e mudanças climáticas**. Disponível em: <https://www.ecodebate.com.br/2017/09/25/populacao-e-mudancas-climaticas-artigo-de-natalia-kanem/>. Acesso em 20/11/2019.

KESSLER M., **Fluidodinâmica Computacional: O que é?** Disponível em: <https://www.esss.co/blog/fluidodinamica-computacional-o-que-e/>, acesso em: 29/05/21.

KUCHTA, J.M. *Investigation of fire and explosion accidents in the chemical, mining, and fuel-related industrial. Manual, Bulletin 680, Bureau of Mines, Pittsburgh, 1985.*

KULESHOV, A. *Software Diesel-RK.* Disponível em: <https://diesel-rk.bmstu.ru/Eng/index.php?page=Main>. Acesso em: 12/06/2021.

LEAL, E. M. **Combustão: Material de Apoio à Disciplina.** Ouro Preto: UFOP, 2017.

LEFEBVRE, A. H., BALLAL, D. R. *Gás Turbine Combustion: Alternative fuels and emissions,* 2010.

MARTINS, R., NACHILUK, K., BUENO, C. R. F., FREITAS, S. M. **O biodiesel de sebo bovino no Brasil.** Informações econômicas, SP, V. 41, 2011.

MORAES, M. S. A. **Biodiesel de sebo: avaliação de propriedades e testes de consumo em motor a diesel.** Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (Instituto de Química), 2008.

MOREIRA, P. C. **Influência do ângulo de injeção nas emissões de poluentes e temperatura de combustão.** Dissertação para obtenção do grau mestre, 2017.

NETO, F. S. L. **Avaliação numérica do desempenho de um motor a combustão interna operando com combustível de alta octanagem.** Dissertação de monografia, 2017.

NOGUEIRA, L. A. H. **Energia: Conceitos e fundamentos,** 2001.

ONU. **A ONU e o meio ambiente,** 2019. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br/91223-onu-e-o-meio-ambiente>. Acesso em 12/09/2019.

RAKOPOULOS, D.C.; RAKOPOULOS, C.D.; GIAKOUMIS, E.G. *Impact of properties of vegetable oil, bio-diesel, ethanol and n-butanol on the combustion and emissions of turbocharged HDDI diesel engine operating under steady and transient conditions.* *Fuel*, v. 156, p. 1-19, 2015.

REVISTA BIOTECNOLOGIA CIÊNCIA E DESENVOLVIMENTO. **Biodiesel: um projeto de sustentabilidade econômica e socioambiental para o Brasil.** Disponível em: http://www.geocities.ws/bueno_reis/biodiesel.pdf. Acesso em 30/05/2021.

REVISTA ECONOMIA E DESENVOLVIMENTO. **Sustentabilidade: evolução dos conceitos teóricos e problemas de mensuração prática.** Disponível em: <https://periodicos.ufsm.br/eed/article/viewFile/3442/1970>. Acesso em 20/10/2019.

REVISTA VIRTUAL DE QUÍMICA. **Tecnologias de produção de biodiesel.** Disponível em: <http://www.uff.br/rvq>. Acesso em 30/05/2021.

RIBAS, W. F., BILOTTA P., JANISSEK, P. R. FILHO, M. A. S. C. e NETO, R. A. P. **Influência do combustível (diesel e biodiesel) e das características da frota de veículos do transporte coletivo de Curitiba, Paraná, nas emissões de NOx.** Artigo técnico, 2016.

SANTOS E FERREIRA. **Biocombustível: Gases do efeito estufa e economia no norte do Brasil.** Disponível em https://www.academia.edu/27726301/BIOCOMBUST%20GASES_DO_EFEITO_E_STUFA_E_ECONOMIA_NO_NORTE_DO_BRASIL Acesso em 20/11/2019.

SARAVANAMUTTOO, H. I. H; ROGERS, G. F. C.; COHEN, H.; STRAZNICKY, P. V. *Gas Turbine Theory*. 5ª edição. Pearson, 2001.

SERRANO, L. M. V. **Análise comparativa do desempenho de motores de combustão interna quando utilizam biocombustíveis.** Universidade de Coimbra, 2012.

SHAPIRO, H. N. e MORAN J. M., *Fundamentals of Engineering Thermodynamics*. 5ª edição. John Wiley & Sons, Inc. 2006.

SHITSUKA, D. M. **Metodologia da pesquisa científica.** 1ª edição. UAB/NTE/UFMS, 2018.

SNYDER, C.A. *Software Chemical Equilibrium for Applications*. Disponível em: <https://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/>. Acesso em: 20/11/2019.

SILVA, C. R. O. **Metodologia do trabalho científico**. Fortaleza: Centro Federal de Educação Tecnológica do Ceará, 2004.

STREHLOW, R. A. *Combustion Fundamentals*, McGraw-Hill, 1985.

UN. *Sustainable Development*. Disponível em: <https://www.un.org/sustainabledevelopment/energy/>. Acesso em 05/11/2019.

VARELLA, T. G. O. **Estudo de biocombustíveis sólidos: importância das cinzas para processos de combustão**. Universidade de Lisboa, 2014.

VIDAL, M.; ROGERS, W. J.; HOLSTE, J. C.; MANNAN, M. S. *A review of estimation methods for flash point and flammability limits*. *Process Safety Progress*, 23, 2004.

VIVAS, B. M. M. **Determinação experimental de limites de inflamabilidade e temperatura de auto-ignição de petróleo e biocombustíveis em tubo de combustão**. Acervo digital, 2010.

WETERINGS, R. A. P. M., OPSCHOOR, J. B. *The eco capacity as challenge to technological development*. Rijswijk. p. 27-28, 1992.

KULESHOV, A. *Diesel-RK*. Disponível em: <https://diesel-rk.bmstu.ru/Eng/index.php?page=Main>. Acesso em 03/06/2021.

YIN, R. K. **Estudo de Caso: Planejamento e Métodos**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

ZABETAKIS, M. G. *Flammability characteristics of combustible gases and vapors*, Bulletin 627, Bureau of Mines, Pittsburgh, 1965.

ZHAO, F. *Experimental measurements and modeling prediction of flammability limits of binary hydrocarbon mixtures*, 2008.

APÊNDICE 1: TUTORIAL PARA O SOFTWARE CHEMICAL EQUILIBRIUM FOR APPLICATIONS

A pesquisa baseia-se nos resultados da simulação computacional do *software* CEA NASA para análise das emissões. Então, no *software*, a tela de entrada solicita a descrição do tipo de problema (cálculo) que será realizado. Para a combustão do biodiesel, a seleção do problema foi o de combustão (*Combustion – Enthalpy and pressure – hp*). Essa seleção irá realizar o cálculo da temperatura de chama adiabática e dos parâmetros termodinâmicos da combustão estabelecendo a pressão de operação. Sequencialmente, abaixo dessa caixa, tem-se outra em que o usuário pode selecionar para determinar a mistura combustível-oxidante. Pode-se selecionar a porcentagem em massa do combustível, a razão oxidante-combustível, a razão de equivalência (ϕ) e a razão de equivalência em função da valência química. A figura 32 mostra a tela de entrada do *software* CEA NASA, no qual serão preenchidos os dados necessários.

Para este trabalho são definidos os intervalos de pressão em 1 até 5 atm, a temperatura inicial em 2200 K e a razão de equivalência (ϕ) variando de 0,8 até 1,2, conforme a figura 32.

A razão de equivalência (ϕ) menor que 1 representa o excesso de oxidante em uma reação de combustão, chamada combustão pobre, e para ϕ maior que 1 considera-se uma mistura rica, isto é, uma mistura com mais combustível e menos oxidante que o necessário estequiométrico. A razão de equivalência igual a 1 ocorre quando a mistura é estequiométrica.

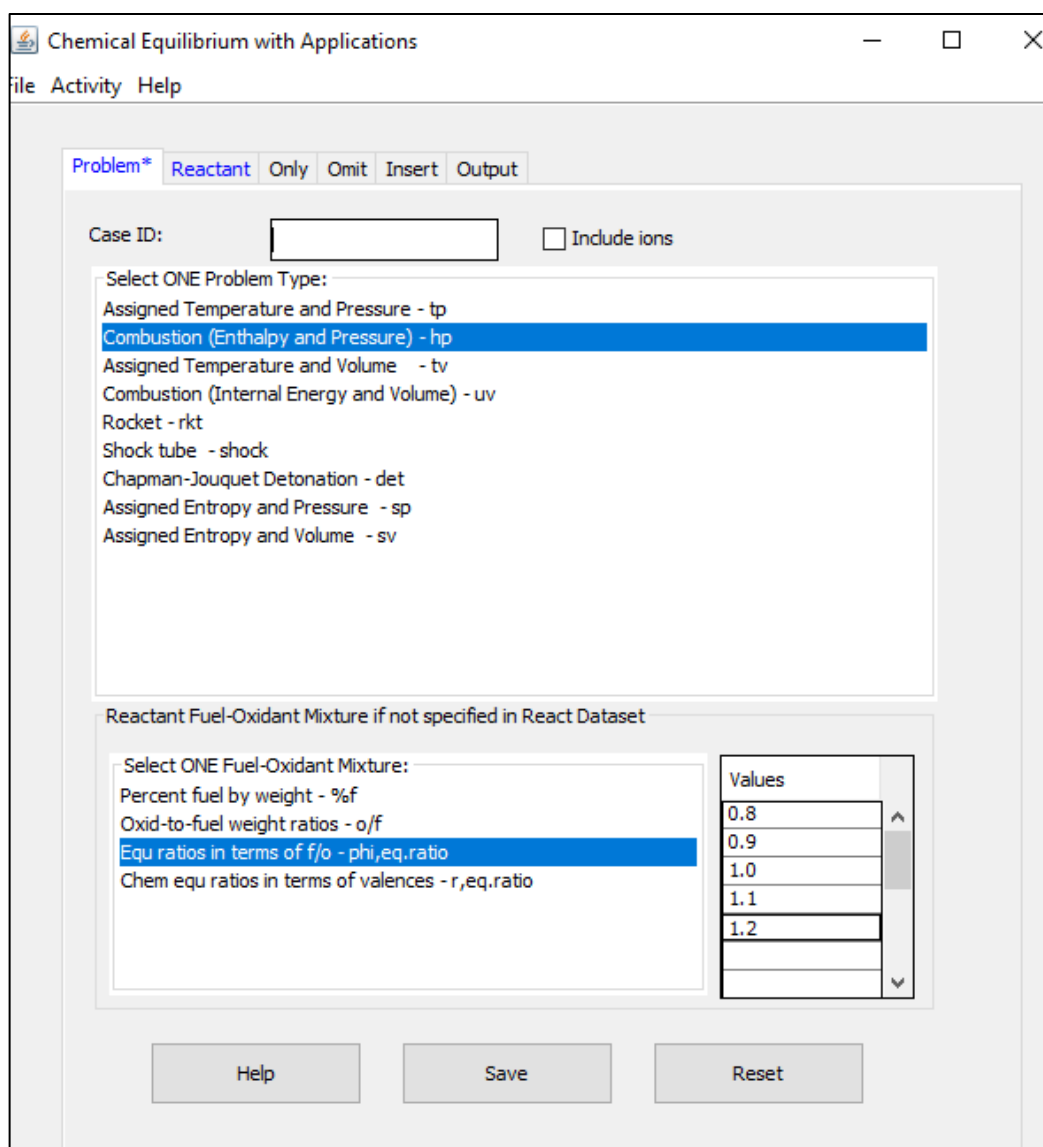


Figura 32. Tela preenchimento dados de entrada do *software* CEA NASA.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na aba Reagentes (*Reactants*), para os dados do biocombustível, deveriam ser inseridos o carbono (C), hidrogênio (H) e oxigênio (O). Porém, o *software* não possui o biodiesel em sua biblioteca termodinâmica. Para contornar esse problema, o *software* disponibiliza duas outras regiões para inserir os dados do usuário. Para isso, é importante ter em mãos as características e a composição química da substância. Com relação ao oxidante, os dados foram preenchidos utilizando o nitrogênio (N₂) e o oxigênio (O₂) disponíveis na biblioteca do *software*. Esses dados podem ser visualizados na figura 33.

Chemical Equilibrium with Applications

File Activity Help

Problem Reactant* Only Omit Insert Output

moles Temperature Unit Kelvin Energy H/U Unit kJ/mol

Reactants Found in the Thermodynamic Library:

Ident	Name	Amount	Temp
oxid	N2	3.76	300
oxid	O2	1	300

Reactants with user-provided names and properties:

Ident	Name	Amount	Temp	EnergyH	EnergyU
fuel	Biodiesel	1	298	40.6	

Enter Chem. Formula with atomic symbols,numbers for each reactant:

Sym1	Num1	Sym2	Num2	Sym3	Num3	Sym4	Num4	Sym5	Num5
C	15	H	30	O	2				

Help Save Reset

Figura 33. Tela preenchimento dos reagentes da combustão do biodiesel de sebo bovino do *software* CEA NASA.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na figura 33 pode-se observar que a composição dos oxidantes, nitrogênio e oxigênio, foram inseridos a uma temperatura de 300 K e a proporção molar de 3,76 e 1, respectivamente. O combustível biodiesel foi inserido na biblioteca termodinâmica do *software*, juntamente com a temperatura de entrada de 298 K e poder calorífico de 40,6 kJ/mol. Além disso, precisa inserir a fórmula química com os símbolos atômicos e os números para cada reagente, $C_{15}H_{30}O_2$.

Por sua vez, os dados do diesel Jet-A podem ser observados na figura 34.

Chemical Equilibrium with Applications

File Activity Help

Problem Reactant* Only Omit Insert Output

Temperature Unit: Kelvin
Energy H/U Unit: kJ/mol
moles

Reactants Found in the Thermodynamic Library:

Ident	Name	Amount	Temp
fuel	Jet-A(L)	1	298
oxid	N2	3.76	300
oxid	O2	1	300

Reactants with user-provided names and properties:

Ident	Name	Amount	Temp	EnergyH	EnergyU

Enter Chem. Formula with atomic symbols, numbers for each reactant:

Sym1	Num1	Sym2	Num2	Sym3	Num3	Sym4	Num4	Sym5	Num5

Help Save Reset

Figura 34. Tela de preenchimento dos reagentes da combustão do diesel Jet-A do *software* CEA NASA. Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme a figura 34, a composição dos oxidantes, nitrogênio e oxigênio, foram inseridos a uma temperatura de 300 K e a proporção molar de 3,76 e 1, respectivamente. O combustível diesel Jet-A já existe na biblioteca termodinâmica do *software*, então foi selecionado e a temperatura de entrada determinada foi de 298 K.

Na aba saída (*output*) do *software* para ambos os fluidos, foram selecionadas as propriedades para a análise da reação de combustão, conforme figura 35.

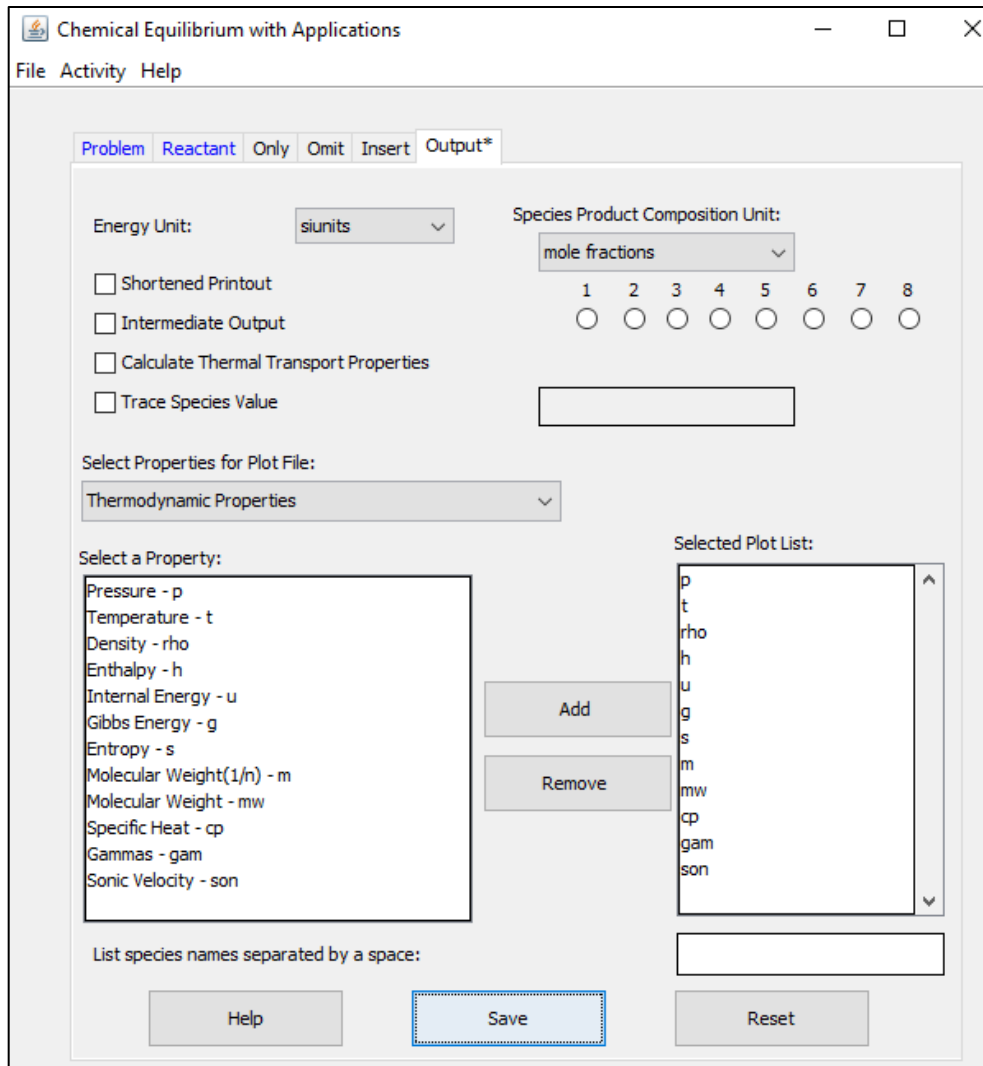


Figura 35. Tela preenchimento dados de saída do *software CEA NASA*.
Fonte: software CEA NASA, 2021.

Para uma análise e comparação mais completa, foram adicionados aos dados de saída todas as propriedades resultantes das combustões como mostra a figura 35.

Finalmente, são executados todos os parâmetros fornecidos ao programa e os resultados do processo de combustão são expostos. Então, tem-se os dados necessários para fazer as análises da combustão e das emissões e verificar a melhor concentração molar na reação.

APÊNDICE 2: TUTORIAL PARA O SOFTWARE DIESEL RK

No *software Diesel-RK* serão realizadas simulações com o Diesel nº 2, Biodiesel SME B100, B40D60 e B20D80 com o objetivo de analisar o comportamento do motor de ignição por compressão e as suas emissões. Para isso, na criação do novo projeto no *software*, inicialmente são feitas configurações para determinar o motor e suas características. Na figura 36 está contida a explicação da função dessa aba.

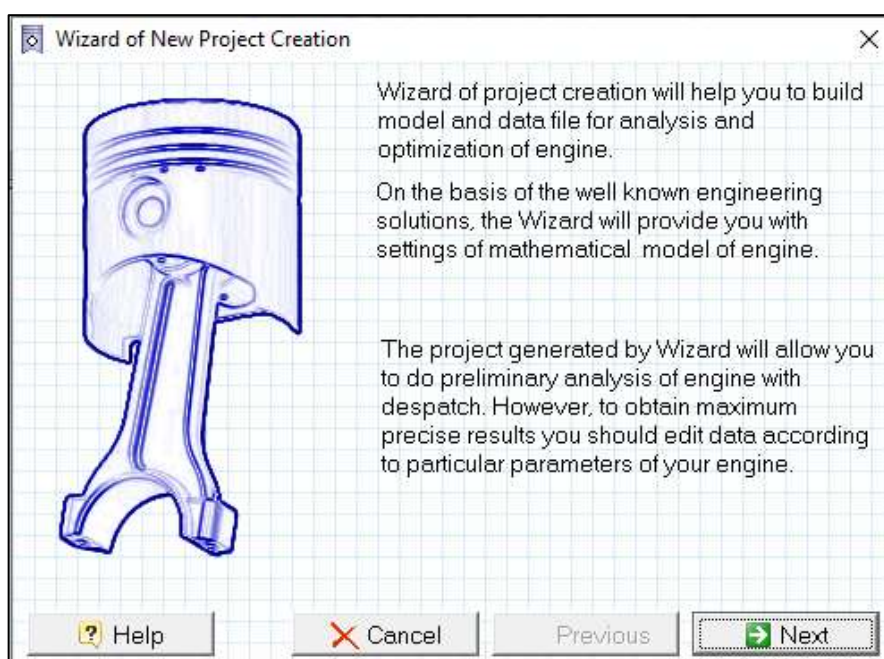


Figura 36. Primeira aba de criação de novo projeto do *software Diesel-RK*.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Observa-se na figura 36 uma descrição do assistente do *software* para ajudar na criação do projeto, construindo um modelo e um arquivo de dados para análise e otimização do motor. Com base nas soluções de engenharia conhecidas o assistente irá fornecer-lhe configurações de modelos matemáticos de motor. O projeto gerado pelo assistente permite uma análise preliminar do motor com envio. No entanto, para obter o máximo de resultados precisos, os dados devem ser editados de acordo com parâmetros particulares do seu motor. A aba seguinte é referente ao motor, conforme figura 37.

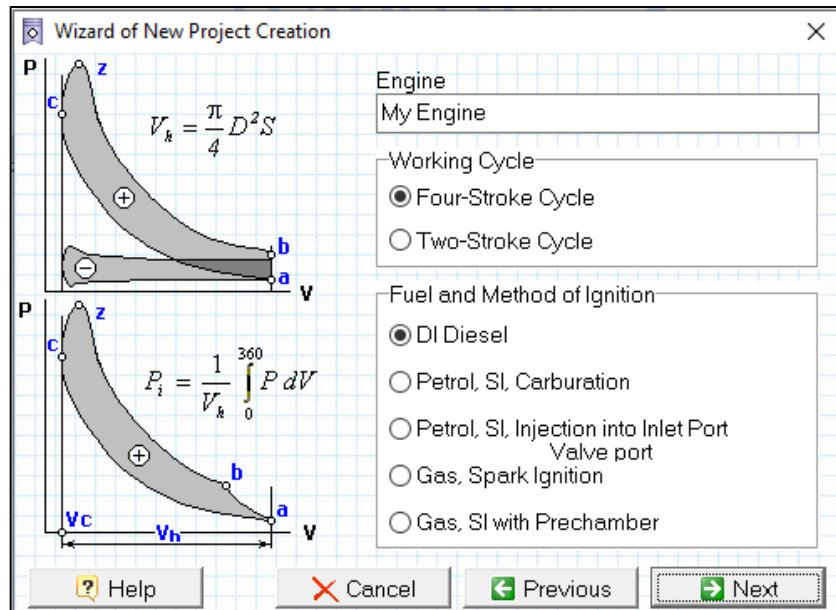


Figura 37. Características do motor: ciclo de funcionamento e combustível e método de ignição selecionadas no *software Diesel-RK*.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na figura 37 estão explícitos o ciclo de funcionamento, o combustível e o método de ignição a ser determinado para o motor. No caso do diesel, é selecionado um motor de quatro tempos e DI Diesel. Em sequência, são determinadas outras características do motor, conforme pode ser visto nas figuras 38 e 39.

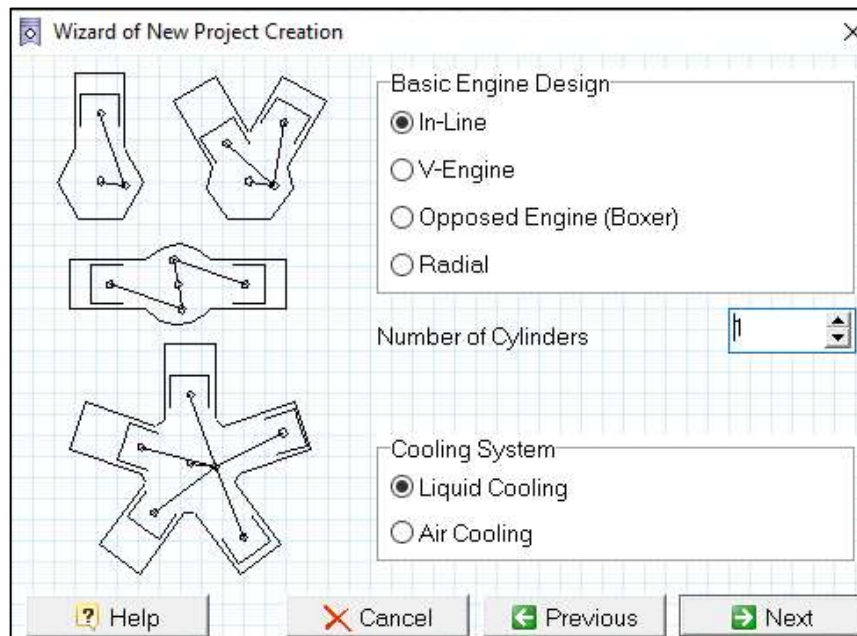


Figura 38. Características do motor: design básico do motor, número de cilindros e sistema de arrefecimento selecionadas no *software Diesel-RK*.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

O projeto básico do motor, o número de cilindros e o sistema de arrefecimento são seleccionados. Para o diesel, determina-se *in-line*, 1 e arrefecimento líquido, respectivamente, conforme figura 39.

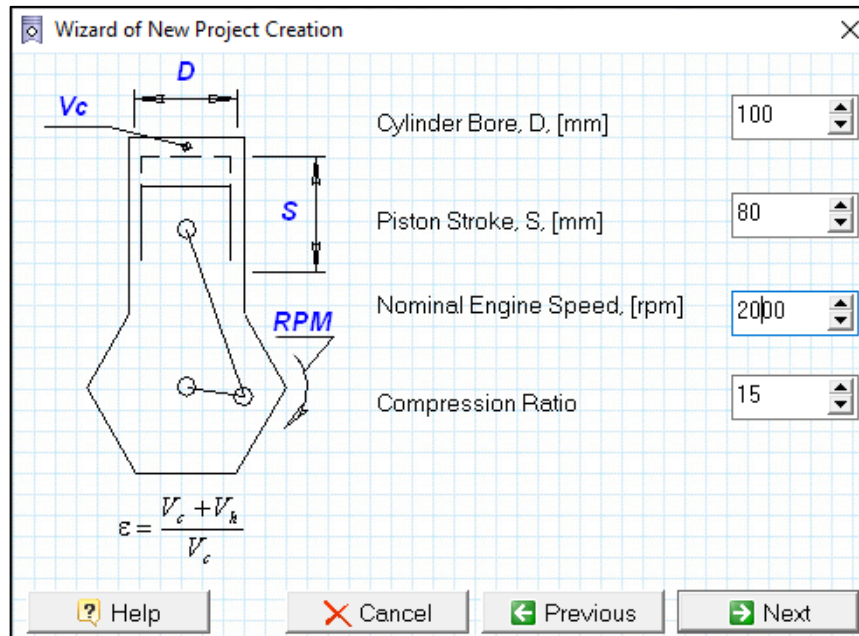


Figura 39. Características do motor: diâmetro do cilindro, curso do pistão, velocidade nominal do motor e taxa de compressão seleccionadas no *software Diesel-RK*.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Observa-se na figura 39, a determinação do diâmetro do cilindro (D), o curso do pistão (S), a velocidade nominal do motor (rpm) e a taxa de compressão. Para o diesel, 100 mm, 80 mm, 2000 rpm e 15. Conforme figura 40 são também determinados os parâmetros do ambiente no nível do mar.

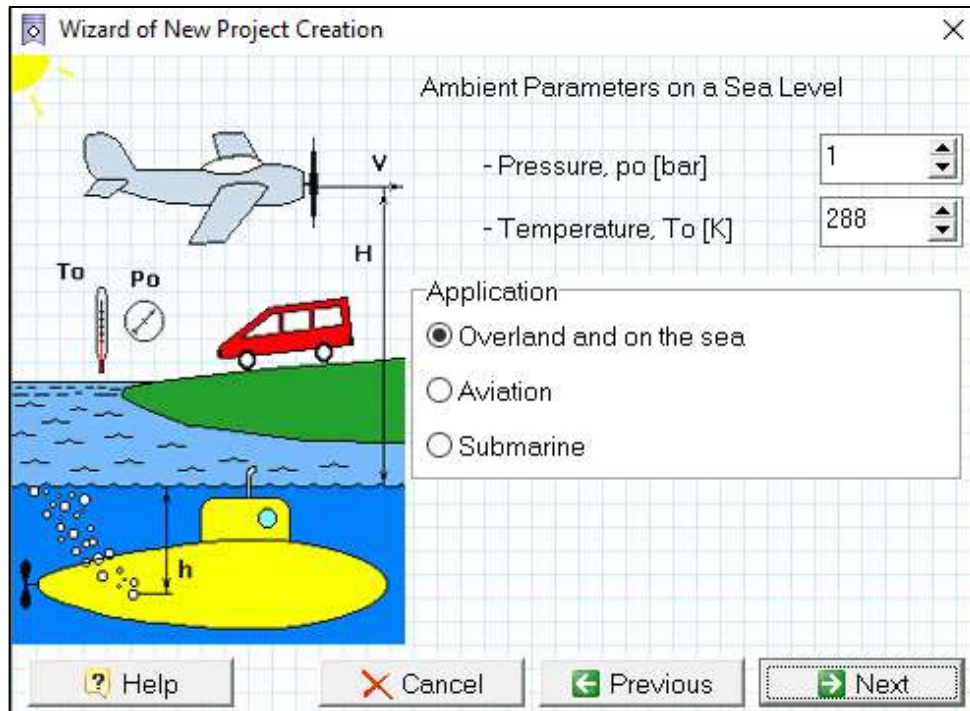


Figura 40. Parâmetros do ambiente no nível do mar e aplicações do *software Diesel-RK*.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Logo, são estipulados a pressão (p_0), a temperatura (T_0) e a aplicação. Como representa a figura 40, para o diesel, p_0 de 1bar, T_0 de 288K e selecionada a opção por via terrestre ou sobre o mar. A figura 41 mostra um gráfico dado pelo tutorial para a determinação da taxa de compressão do compressor.

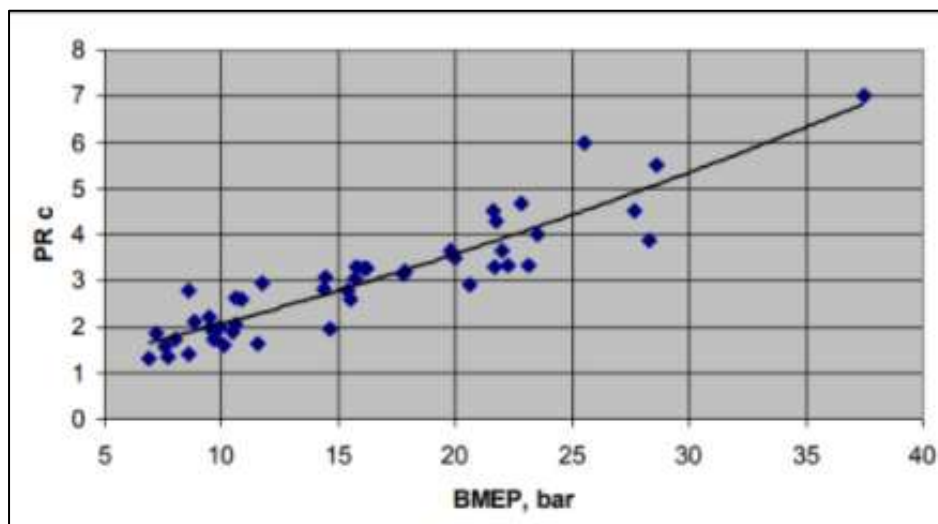


Figura 41. Razão de pressão do compressor em função da BMEP.
Fonte: Tutorial 2 *Diesel-RK*, 2021.

Como mostra a figura 41, existe uma influência entre a pressão média efetiva (BMEP) e a taxa de compressão do compressor para o regime de potência máxima, sendo perceptivelmente

crecente. Por fim, o assistente mostra mais algumas características a serem definidas do motor (figura 42).

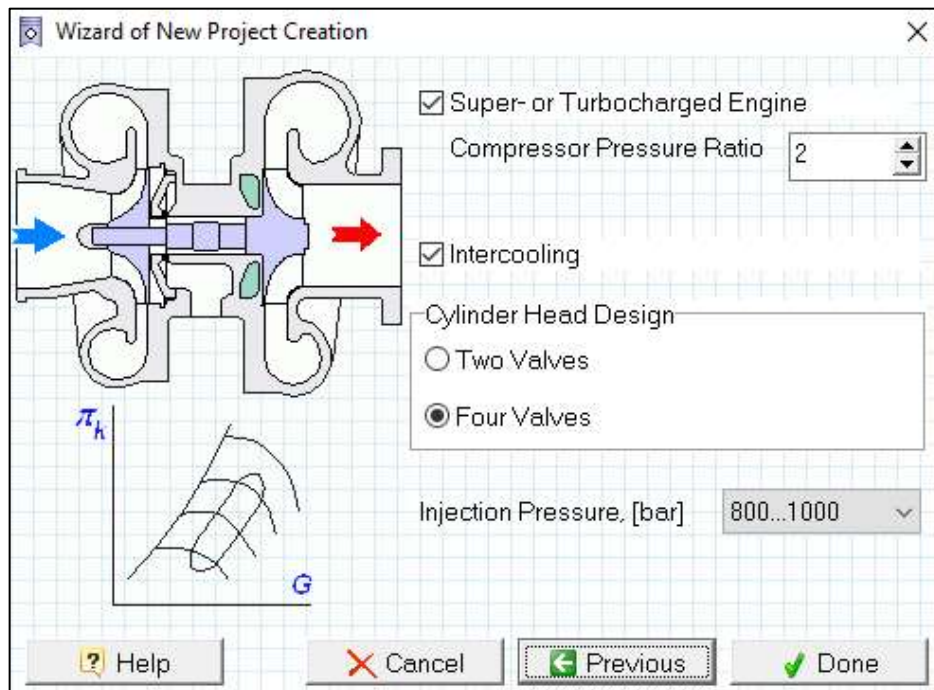


Figura 42. Características do motor: turbo ou superalimentado e inter resfriamento selecionadas no *software Diesel-RK*.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

As opções de motor super ou turboalimentado e de inter resfriamento podem ser assinaladas, juntamente o preenchimento da relação de pressão do compressor, desenho da cabeça do cilindro, com duas ou quatro válvulas e a pressão de injeção. Então, novamente no caso do diesel, conforme figura 42, ambas as opções são marcadas, a taxa é de 2, a cabeça possui quatro válvulas e a pressão de injeção é de 800 a 1000 bar.

Por conseguinte, após determinar todas as características descritas acima com a ajuda do assistente do *software*, a sua tela inicial é aberta e nela novos parâmetros são definidos em acordo com o que for requerido para proporcionar uma simulação e análise do comportamento dos combustíveis completa.

O próximo passo consiste em editar a tabela para os modos de operação do motor para obter como resultado final as características de desempenho em função de RPM. Para o motor estudado o incremento de RPM definido está representado na figura 43.

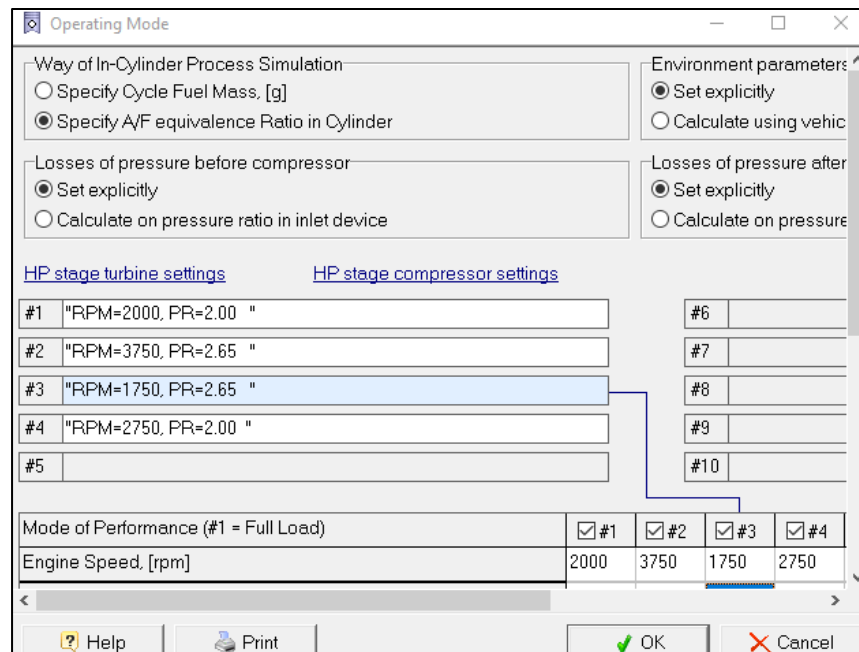


Figura 43. Sistema de operação – definição de RPM.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Na figura 43 mostra que foi definido RPM= 2000, 3750, 1750, 2750 e PR= 2.00, 2.65, 2.65, 2.00, respectivamente. No Diesel-RK existem muitas abas que vão moldar os resultados requeridos, dentre elas está o sistema de injeção de combustível, como mostra a figura 44.

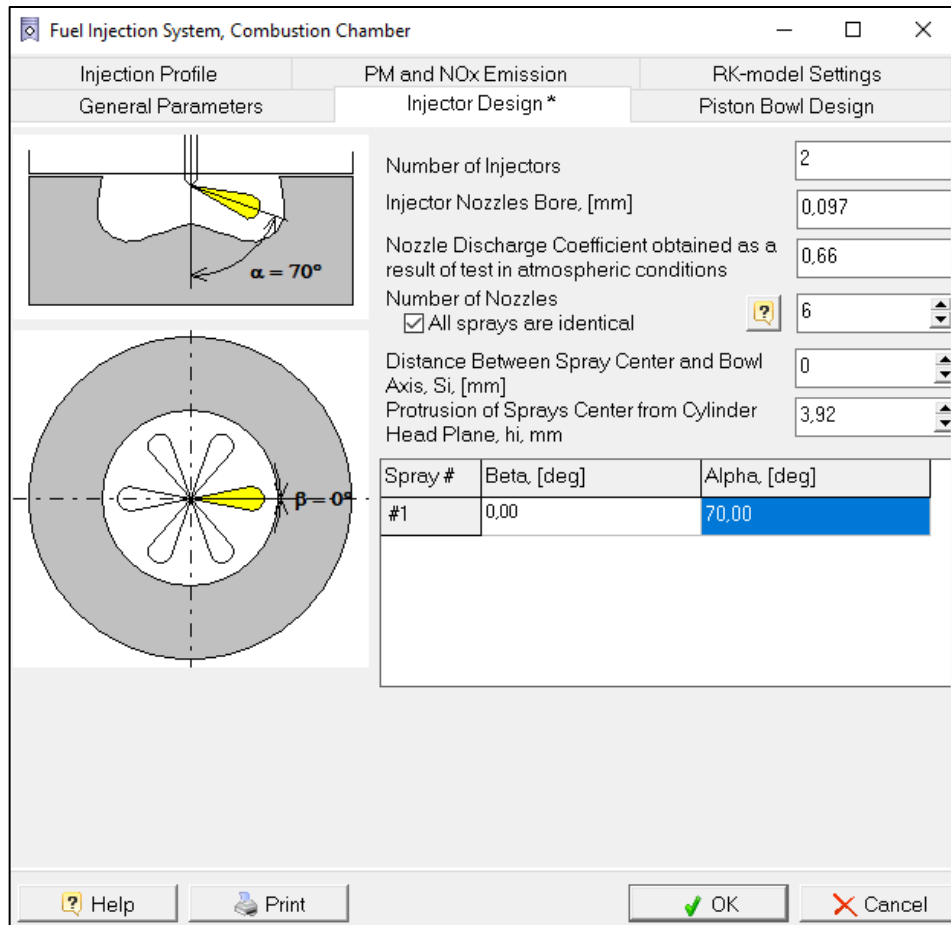


Figura 44. Sistema de injeção de combustível – projeto do injetor.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

A figura 44 representa o sistema de injeção de combustível no *software*, o qual possibilita a caracterização do perfil de injeção, emissões de material particulado (PM) e óxidos de nitrogênio (NOx), configuração do modelo RK, parâmetros gerais, projeto de injeção e projeto da cabeça do pistão. Primeiramente, na configuração feita para o diesel, seleciona-se o projeto de injeção, determinando o número de injetores igual a 2, injetores com furos de 0,15 mm, coeficiente de descarga dos injetores obtidos como resultado do ensaio em condições atmosféricas de 0,66, o número de injetores igual a 6, assinalando a possibilidade de todos os *sprays* são idênticos, a distância entre o centro do *spray* e o eixo da cabeça do pistão como zero e a protrusão do centro de pulverização a partir do plano da cabeça do cilindro como 3,92 mm. Outra configuração é feita sobre o projeto da cabeça do pistão, representado na figura 45.

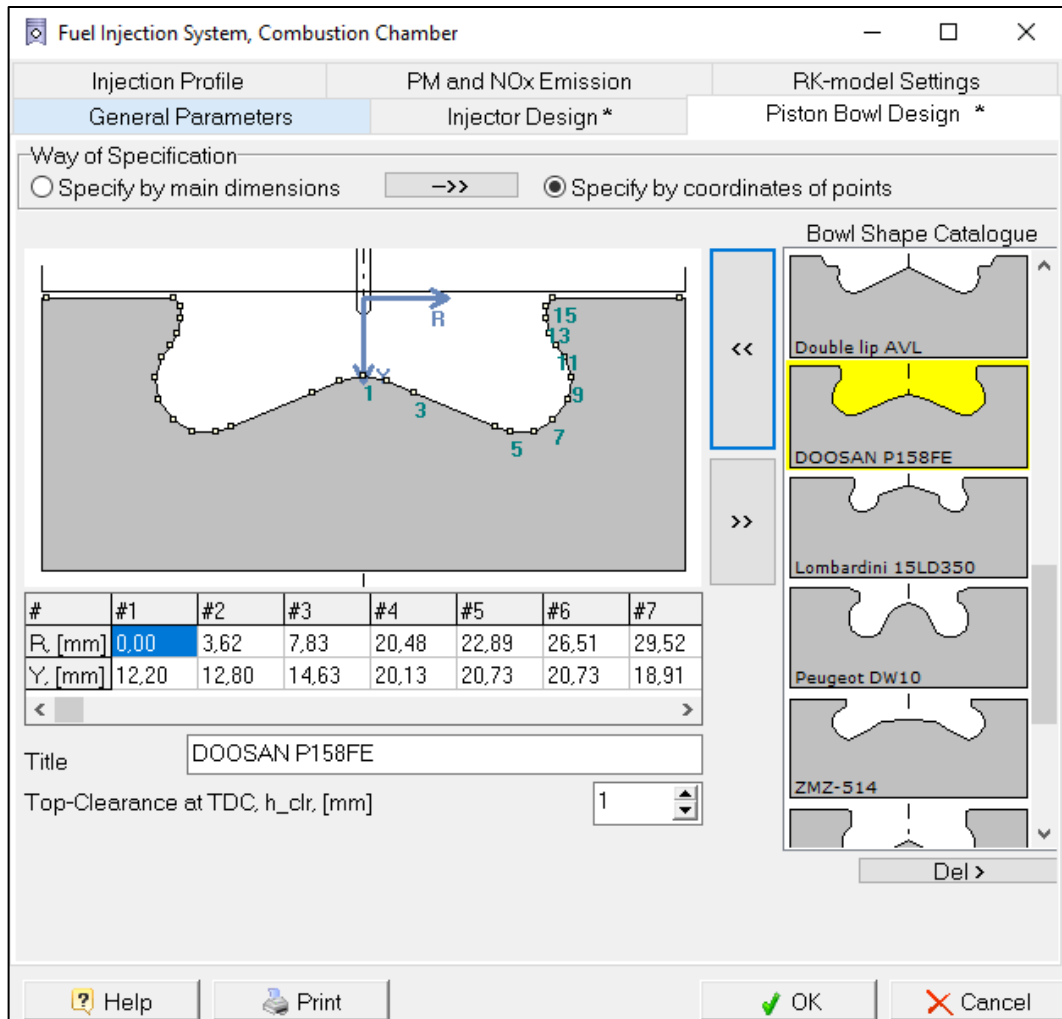


Figura 45. Sistema de injeção de combustível – determinação da câmara de combustão.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

No *software* está contido diversos modelos para a determinação do projeto, como mostra a figura 45. O catálogo de formas da cabeça do pistão mostra as opções e a escolhida é representada ao lado, no caso a *DOOSAN P158FE* foi selecionada.

O sistema é *common Rail*, por isso utiliza-se a pressão 1600 bar e o respectivo ângulo de manivela - *Crank Angle (CA)* de 18,16°, conforme figura 46.

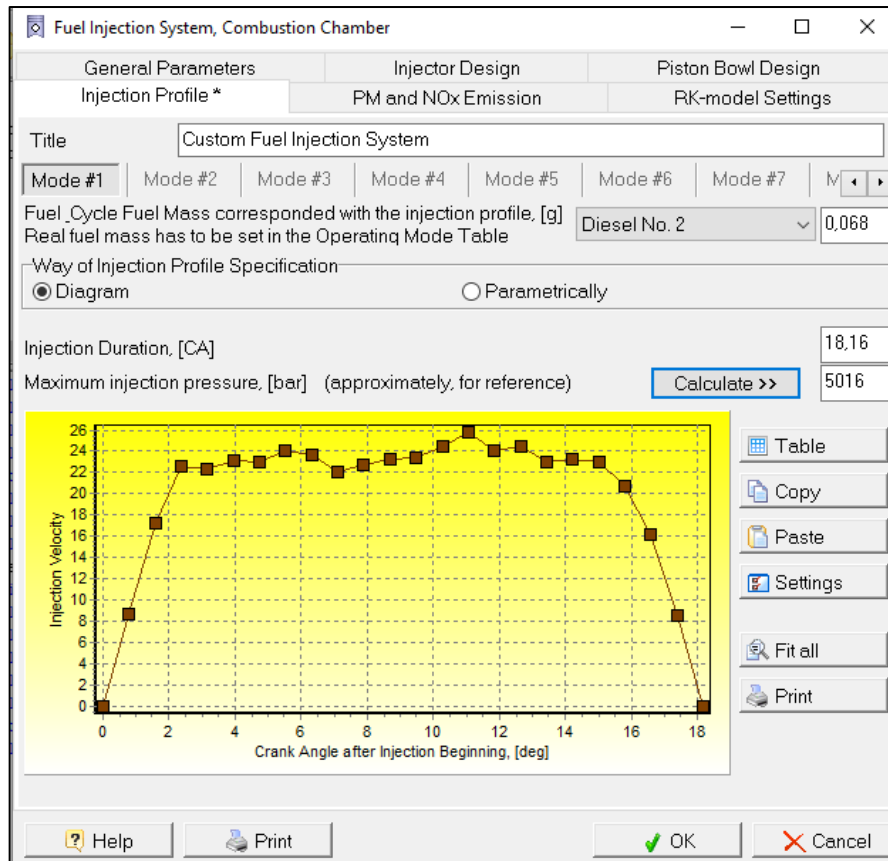


Figura 46. Característica da injeção de combustível para diferentes suprimentos de combustível de 0,068g.

Fonte: Pesquisa direta, 2021.

O *software* apresenta uma gama de opções de configurações, mas para o motor e combustível requeridos essas são suficientes. Logo, a aba combustível é selecionada, conforme mostra a figura 47.

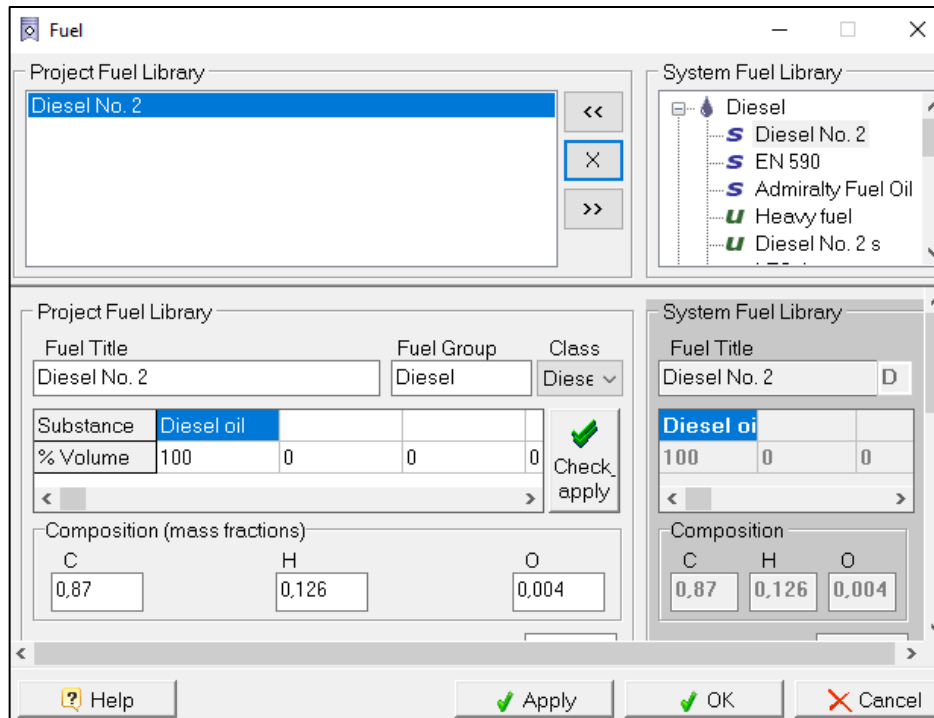


Figura 47. Seleção do combustível Diesel nº 2.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Conforme a figura 47, o *software* possui uma biblioteca de combustíveis do sistema, sendo o Diesel nº. 2 selecionado e posteriormente suas características detalhadas na mesma aba. Da mesma forma, na biblioteca de combustíveis do *software* é selecionado o Biodiesel SME B100, Mistura B40D60 e Mistura B20D80, respectivamente nas figuras 48, 49 e 50.

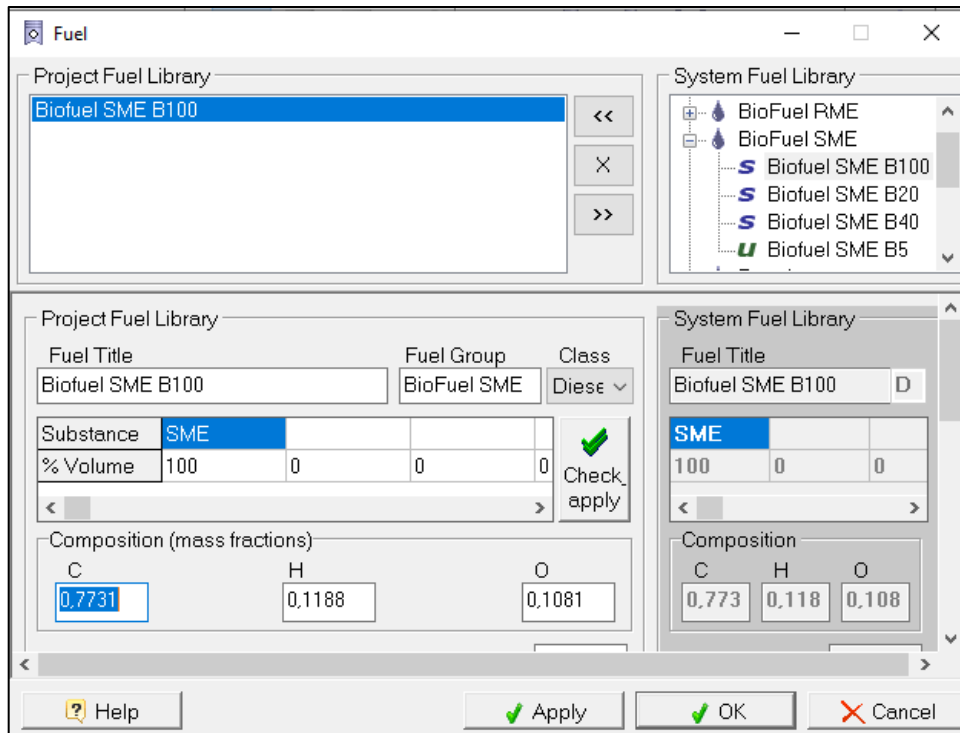


Figura 48. Seleção do combustível Biodiesel SME B100.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

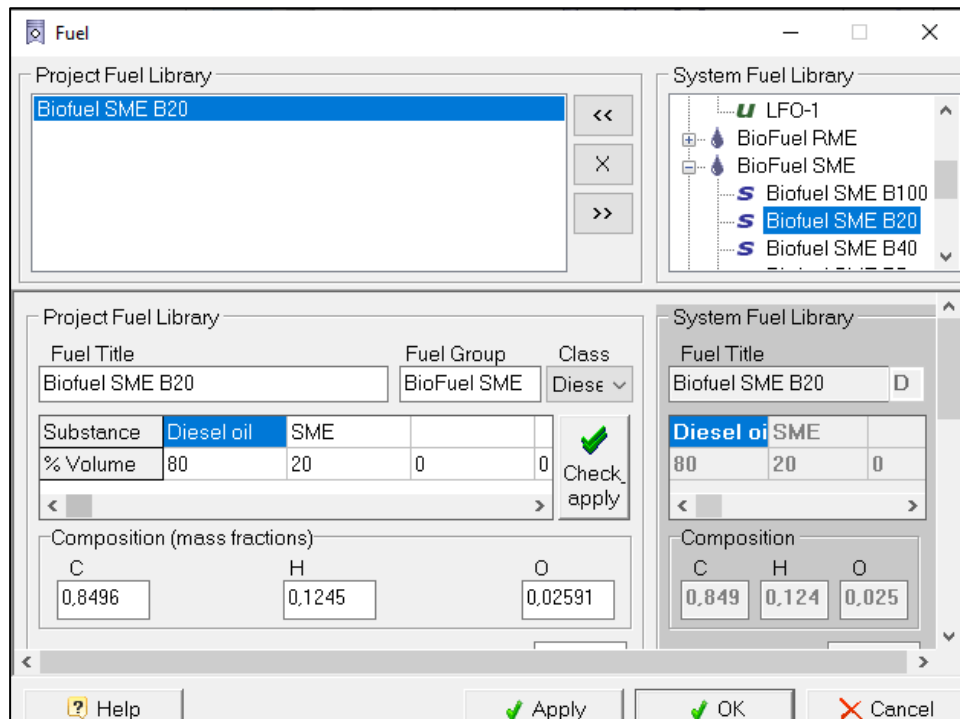


Figura 49. Seleção do combustível Biodiesel SME B20D80 (mistura).
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

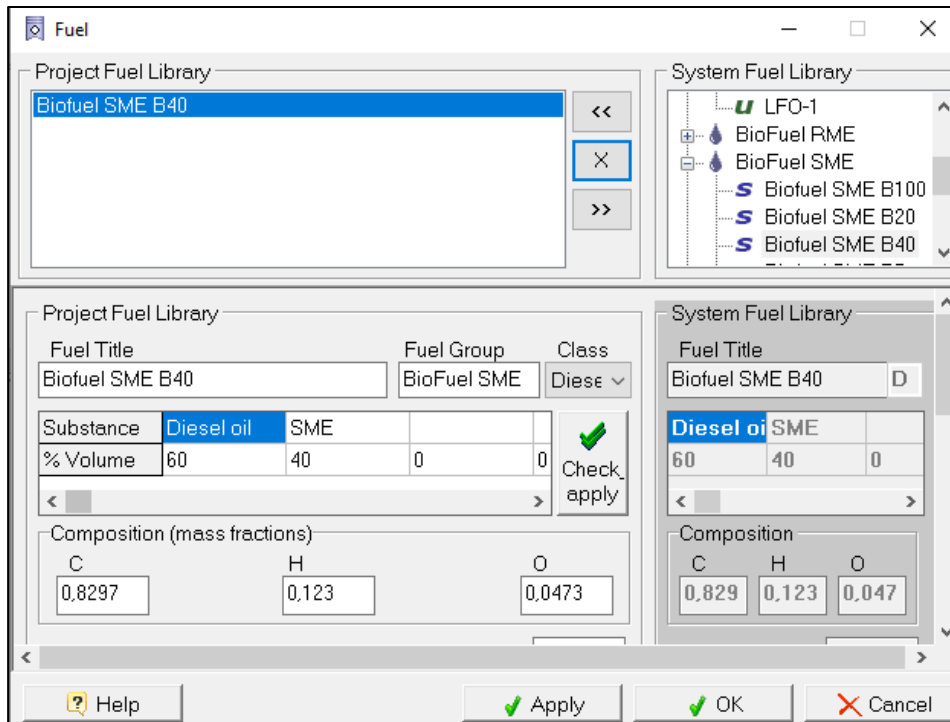


Figura 50. Seleção do combustível Biodiesel SME B40D60 (mistura).
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Após a avaliação e escolha dos três tipos de biodiesel, a simulação é iniciada para cada uma delas, como na figura 51.

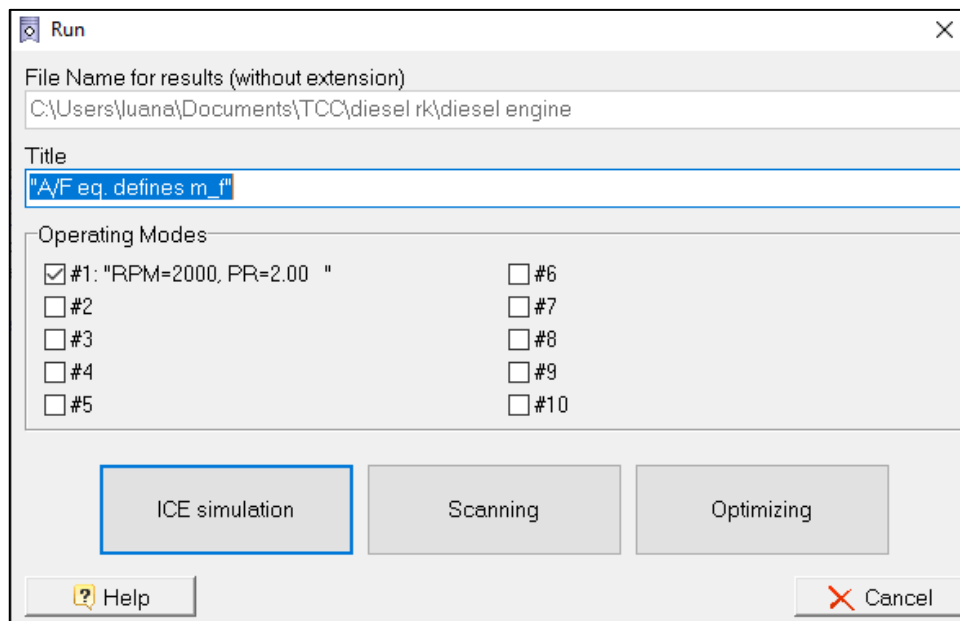


Figura 51. Iniciar a simulação no software *Diesel-RK*.
Fonte: Pesquisa direta, 2021.

Como mostra a figura 51, para executar a simulação basta apertar na opção *ICE Simulation* (*Internal Combustion Engines Simulation – Simulação de MCIs*) ou na seta azul (*RUN*) no canto

superior do software. Como resultado tem-se a tabela de parâmetros integrais do motor (*Engine Parameters*), a injeção de combustível e taxa de liberação de calor (*Fuel Injection and Heat Release*). O software *Diesel-RK* tem como resultados os parâmetros de eficiência e potência, ambientais, da combustão e ecológico dos combustíveis Diesel nº 2 (D100), Biodiesel SME B100, Mistura B40D60 e Mistura B20D80.