Universidade Federal do Rio de Janeiro
Escola Politécnica

ESTIMATIVA INVERSA BAYESIANA DA TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR DE UM MOTOR MARÍTIMO DIESEL USANDO FILTROS DE PARTÍCULAS PARA A ANÁLISE DA COMBUSTÃO E DE SUAS FASES

Marcelo de Alencastro Pasqualette

Projeto de Graduação apresentado ao Curso de Engenharia Mecânica da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro

Orientadores: Marcelo José Colaço
Albino José Kalab Leiróz

Rio de Janeiro
Março de 2015

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

Departamento de Engenharia Mecânica

DEM/POLI/UFRJ

ESTIMATIVA INVERSA BAYESIANA DA TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR DE UM MOTOR MARÍTIMO DIESEL USANDO FILTROS DE PARTÍCULAS PARA A ANÁLISE DA COMBUSTÃO E DE SUAS FASES

Marcelo de Alencastro Pasqualette

PROJETO FINAL SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA DA ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE ENGENHEIRO MECÂNICO.

Aprovado por:

_____

Prof. Marcelo José Colaço, D.Sc.

_____

Prof. Albino José Kalab Leiroz, Ph.D.

_____

Prof. Hélcio Rangel Barreto Orlande, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 2015

Pasqualette, Marcelo de Alencastro

Estimativa Inversa Bayesiana da Taxa de Liberação de Calor de um Motor Marítimo Diesel Usando Filtros de Partículas para a Análise da Combustão e de Suas Fases/ Marcelo de Alencastro Pasqualette. – Rio de Janeiro: UFRJ/ Escola Politécnica, 2015.

XIII, 91 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Marcelo José Colaço e Albino José Kalab Leiróz

Projeto de Graduação – UFRJ/ Escola Politécnica/ Curso de Engenharia Mecânica, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 87-91.

1. Combustão em Motores Diesel. 2. Problemas Inverso Não-estacionário. 3. Filtro de Partícula Bayesiano. 4. Óleo Marítimo Diesel. 5. Modelo Termodinâmico de Combustão. I. Colaço, Marcelo José *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Curso de Engenharia Mecânica. III. Título.

AGRADECIMENTOS

Para começar, gostaria de prestar enormes agradecimentos ao meu orientador Marcelo José Colaço. Não queria agradecer só pela orientação deste trabalho, mas sim por ser o mentor da minha vida acadêmica desde o início da faculdade, oferecendo sempre conselhos, oportunidades e sabedoria que viriam a me transformar em um engenheiro com gosto pelo que faz e, principalmente, pela pesquisa. Obrigado mesmo!

Gostaria de prestar agradecimentos ao também meu orientador Albino José Kalab Leiróz, cuja palestra que eu assisti no meu primeiro período me inspirou a procurar a Iniciação Científica no Laboratório de Máquinas Térmicas e que sempre me ajudou nos momentos que eu precisava ao longo destes cinco anos. Muito obrigado!

Quero agradecer ao Programa de Recursos Humanos 37 da ANP, "Engenharia Mecânica para o Uso Eficiente de Biocombustíveis", pela bolsa dada a mim durante esses últimos dois anos. Agradeço também pelo ciclo de palestras realizadas pelo Programa cujos ensinamentos passados me ajudaram a me tornar um engenheiro com bons conhecimentos acerca da indústria de biocombustíveis e da situação energética mundial.

Gostaria de agradecer também aos profissionais do Laboratório de Máquinas Térmicas, por se mostrarem sempre solícitos a me auxiliar durante minha Iniciação Científica e a realização deste Projeto de Graduação. Agradeço também aos meus amigos e colegas de lá, pela companhia em congressos e pela ajuda quando eu precisava.

Queria agradecer aos meus colegas e amigos da SINTEF do Brasil pelos ensinamentos que marcaram minha entrada no mundo profissional.

Queria dizer obrigado a todos os meus amigos: aqueles que eu fiz na faculdade, aqueles que me conhecem desde os tempos de colégio pH e aqueles que me conhecem desde muito pequeno. Obrigado por tornarem esses cinco anos prazerosos, divertidos e leves, mesmo nos momentos mais difíceis na estrada para me tornar engenheiro mecânico.

Queria agradecer imensamente a toda a minha família pela amizade e suporte dado a mim nesses anos. Mas especialmente queria agradecer ao meu avô Geraldo, que faleceu pouco antes do término deste trabalho, e cuja alegria e jeito leve de se viver deixa grandes saudades.

Por fim, gostaria de agradecer acima de tudo, ao meu pai Antônio, a minha mãe Sônia e ao meu irmão Guilherme pela amizade, suporte e amor incondicionais dados a mim desde sempre, e que me tornaram a pessoa que eu sou hoje. Obrigado por tudo.

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/ UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Mecânico.

Estimativa Inversa Bayesiana da Taxa de Liberação de Calor de um Motor Marítimo Diesel Usando Filtros de Partículas para a Análise da Combustão e de Suas Fases

Marcelo de Alencastro Pasqualette

Março/2015

Orientadores: Marcelo José Colaço e Albino José Kalab Leiróz

Curso: Engenharia Mecânica

A análise da combustão em motores diesel é de grande importância para a diminuição dos níveis de emissão de poluentes advindos do processo e para a obtenção de uma maior eficiência deste. A principal forma de o fazer é através da obtenção da taxa transiente de liberação de calor pelo combustível, na qual a duração e o início das diferentes fases da combustão podem ser facilmente determinados. A obtenção deste parâmetro usualmente se dá por correlações empíricas calibradas com dados experimentais por intermédio de um modelo de combustão, o que prejudica a capacidade de predição dessas metodologias. O objetivo deste trabalho é o estudo da combustão de um motor marítimo diesel operando com óleo diesel marítimo a diferentes cargas, através da análise de sua taxa de liberação de calor. Sua obtenção será feita pela resolução de um problema inverso não-estacionário por inversão estatística, isto é, por uma abordagem Bayesiana. No algoritmo de solução será formulado um filtro de partículas Bayesiano a ser usado em conjunto com um modelo de combustão simplificado e com medições da pressão na câmara de combustão. A influência de diversos parâmetros da metodologia nos resultados é analisada. As estimativas da metodologia deste trabalho são comparadas com os resultados obtidos com metodologias tradicionais e são validadas pela comparação do ângulo de início da combustão obtidos através delas com aqueles obtidos por outras técnicas. Por fim, as fases da combustão são analisadas com base nos resultados da metodologia para a taxa de liberação de calor.

Palavras-chave: Combustão em Motores Diesel, Problemas Inversos Não-estacionários, Filtros de Partículas Bayesianos, Óleo Marítimo Diesel, Modelo Termodinâmico de Combustão.

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Engineer.

Bayesian Inverse Estimation of the Heat Release Rate of a Marine Diesel Engine Using Particle Filters for the Analysis of the Combustion and of Its Phases

Marcelo de Alencastro Pasqualette

March/2015

Advisors: Marcelo José Colaço and Albino José Kalab Leiróz

Course: Mechanical Engineering

The analysis of the combustion in diesel engines is of major importance for reducing the pollutant emission levels originated from this process and for improving its efficiency. The main way for performing it is through the determination of the transient rate of heat release by the fuel, from which the duration and start of each phase of the combustion can be easily determined. The determination of this parameter is usually made by empirical correlations calibrated with experimental data, which is a menace for the predictability of these methodologies. The object of this work is to study the combustion of a marine diesel engine operating with marine diesel oil at different loads, through the analysis of the heat release rate. It will be estimated by the solution of a nonstationary inverse problem using statistical inversion, that is, a Bayesian approach. For the solution algorithm, a Bayesian particle filter will be formulated and used together with a simplified combustion model and with in-cylinder pressure measurements. The estimates of this work will be compared with the results obtained with conventional methodologies and will be validated by the comparison of the start of combustion crankshaft angle obtained through it with the ones obtained by other techniques. At last, the phases of the combustion will be analysed using the heat release rate estimates from the methodology.

Keywords: Diesel Engines Combustion, Nonstationary Inverse Problems, Bayesian Particle Filters, Marine Diesel Oil, Thermodynamic Combustion Model.

Sumário

Lista de Figuras vi

Lista de Tabelas x

Lista de Símbolos xi

1. INTRODUÇÃO 1

1.1. Objetivo e Metas 3
1.2. Organização do Trabalho 4

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA E ESTADO DA ARTE 5

2.1. Fundamentos da Combustão em Motores Diesel 5
2.1.1. Tipos de Sistemas de Injeção de Combustível 6
2.1.2. Fases da Combustão em Motores Diesel DI 6
2.2. Modelagem da Combustão em Motores Diesel 9
2.2.1. Modelos Zero-Dimensionais em Motores Diesel 10
2.2.2. Modelos Quasi-Dimensionais em Motores Diesel 12
2.2.3. Modelos Multidimensionais em Motores Diesel 13
2.3. Técnicas para a Identificação do Início da Combustão 15
2.4. Abordagem Bayesiana de Problemas Inversos 17

3. METODOLOGIA 20

3.1. Determinação da Taxa de Calor Liberada pelo Combustível 20
3.2. Modelo de Combustão 24
3.2.1. Massa da Mistura 27
3.2.2. Razão dos Calores Específicos 28
3.2.3. Equacionamento da Geometria 29
3.2.4. Transferência de Calor Através das Paredes do Cilindro 32
3.3. Formulação da Abordagem Bayesiana de Problemas Inversos 34
3.4. Formulação do Problema Inverso Não-Estacionário 36
3.5. Filtro *Sampling Importance Resampling* (SIR) 39
3.6. Algoritmo Final 42

4. APARATO EXPERIMENTAL 48

4.1. O Motor Marítimo Diesel e a Bancada Experimental 48
4.2. Descrição dos Ensaios 50
4.3. Obtenção dos Dados de Entrada do Modelo de Combustão 53

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO 57

5.1. Identificação do Ângulo de Início da Combustão 57
5.2. Análise da Influência dos Parâmetros do Modelo de *Random-Walk* 61
5.3. Análise da Influência do Número de Partículas 64
5.4. Comparação com os Resultados da Metodologia Tradicional 75
5.5. Validação com o Ângulo de Início da Combustão 78
5.6. Análise das Fases da Combustão 81

6. CONCLUSÕES 85

6.1. Sugestões para Trabalhos Futuros 86

7. REFERÊNCIAS 87

Lista de Figuras

Figura 1 - Energia primária produzida no Brasil por fonte (M.M.E., 2014). 2

Figura 2 - O processo de combustão em motores diesel DI e suas diferentes fases, adaptado de GUPTA (2013). 7

Figura 3 - Geometria do conjunto cilindro-pistão-biela-virabrequim. 29

Figura 4 - Predição e atualização (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). 38

Figura 5 - Representação do filtro SIR, adaptada de RISTIC *et al*. (2004)..... 41

Figura 6 - Bancada de testes *Bunker I* do Laboratório de Máquinas Térmicas. 48

Figura 7 - O motor marítimo diesel MAN Innovator 4C instalado na bancada *Bunker I*. 49

Figura 8 - Sensor (Honeywell 3010AN) de variação do ângulo do virabrequim. 50

Figura 9 - Sensor (AVL GU21D) de pressão na câmara de combustão. 50

Figura 10 - Sala de controle da bancada Bunker I, foto retirada do site do Laboratório de Máquinas Térmicas (http://www.lmt.coppe.ufrj.br/, acessado em 15/02/2015). 51

Figura 11 - Pressão experimental do ciclo médio para 25% de carga. 52

Figura 12 - Pressão experimental do ciclo médio para 50% de carga. 52

Figura 13 - Pressão experimental do ciclo médio para 75% de carga. 52

Figura 14 - Pressão experimental do ciclo médio para 100% de carga. 52

Figura 15 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 1. 59

Figura 16 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 2. 59

Figura 17 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 3. 59

Figura 18 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 4. 59

Figura 19 - Início da combustão obtido com diferentes técnicas para o ciclo médio de 100% de carga. 60

Figura 20 - Valores médios do ângulo de início da combustão e seus intervalos de 95% de confiança para quatro diferentes técnicas. 61

Figura 21 – Média do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do parâmetro de tendência. 62

Figura 22 – Desvio padrão do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do parâmetro de tendência. 63

Figura 23 - Média do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do passo do modelo de *Random-Walk*. 63

Figura 24 - Desvio padrão do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do passo do modelo de *Random-Walk*..... 64

Figura 25 - Média do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições para as quatro cargas em função do número de partículas do filtro SIR. 65

Figura 26 - Desvio padrão do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições para as quatro cargas em função do número de partículas do filtro SIR. 65

Figura 27 – Média do tempo de CPU das 500 repetições para as quatro cargas em função do número de partículas do filtro SIR. 65

Figura 28 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 25% de carga..... 67

Figura 29 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 25% de carga. 67

Figura 30 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 25% de carga. 68

Figura 31 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 25% de carga. 68

Figura 32 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 25% de carga. 68

Figura 33 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 50% de carga..... 69

Figura 34 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 50% de carga. 69

Figura 35 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 50% de carga. 70

Figura 36 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 50% de carga. 70

Figura 37 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 50% de carga. 70

Figura 38 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 75% de carga..... 71

Figura 39 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 75% de carga. 71

Figura 40 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 75% de carga. 72

Figura 41 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 75% de carga. 72

Figura 42 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 75% de carga. 72

Figura 43 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 100% de carga..... 73

Figura 44 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 100% de carga. 73

Figura 45 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 100% de carga. 74

Figura 46 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 100% de carga. 74

Figura 47 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 100% de carga. 74

Figura 48 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 25% de carga. 76

Figura 49 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 25% de carga. 76

Figura 50 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 50% de carga. 77

Figura 51 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 50% de carga. 77

Figura 52 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 75% de carga. 77

Figura 53 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 75% de carga. 77

Figura 54 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 100% de carga. 77

Figura 55 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 100% de carga. 77

Figura 56 – Início da combustão pela Técnica 5 para 25% de carga. 79

Figura 57 – Início da combustão pela Técnica 5 para 50% de carga. 79

Figura 58 – Início da combustão pela Técnica 5 para 75% de carga. 79

Figura 59 – Início da combustão pela Técnica 5 para 100% de carga. 79

Figura 60 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 25%. 79

Figura 61 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 50%. 80

Figura 62 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 75%. 80

Figura 63 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 100%. 80

Figura 64 – Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 25% de carga com a metodologia do trabalho. 81

Figura 65 – Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 50% de carga com a metodologia do trabalho. 82

Figura 66 – Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 75% de carga com a metodologia do trabalho. 82

Figura 67 - Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 100% de carga com a metodologia do trabalho. 82

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Coeficientes da expressão polinomial para o c_P (ABU-NADA *et al*., 2006). 29

Tabela 2 - Coeficientes da velocidade da mistura ar-combustível da equação de WOSCHNI (1967). 33

Tabela 3 – Algoritmo do filtro SIR (ARULAMPALAM *et al*., 2002). 41

Tabela 4 - Algoritmo final para a estimativa da taxa de liberação de calor. 46

Tabela 5 - Parâmetros geométricos de cada cilindro do motor marítimo (MAN Diesel & Turbo, 2010a). 53

Tabela 6 - Ângulos de fechamento da válvula de admissão e de abertura da válvula de exaustão. 53

Tabela 7 - Consumo específico de combustível (SFC) por carga (MAN Diesel & Turbo, 2010b). 54

Tabela 8 - Vazões e pressão na admissão para as quatro cargas do motor marítimo. 55

Tabela 9 - Resultados para o ângulo de início da combustão obtidos com as quatro técnicas. 60

Tabela 10 – Parâmetros extras necessários à metodologia tradicional. 76

Tabela 11 - Porcentagem do calor liberado pelo combustível em cada fase. 83

Tabela 12 - Comparação do calor total obtido com a integral de $\delta Q_{\mathrm{comb}}/d\theta$ com o calculado por $m_{\mathrm{comb}}PCI$. 83

Lista de Símbolos

$A(\theta)$	Área da câmara de combustão.
$A_{\text{lat}}(\theta)$	Área lateral do cilindro.
A_m	Área lateral do volume morto do cilindro.
$A_{\text{pistão}}$	Área da face superior do pistão.
A_{sup}	Área do cabeçote do cilindro.
A/C	Razão ar-combustível mássica.
a	Constante ajustável da função de Wiebe.
B	Diâmetro do cilindro.
C	Raio do virabrequim.
C_i	Coeficientes para o cálculo da velocidade média da mistura ar-combustível.
$c_P(T)$	Calor específico a pressão constante.
$c_V(T)$	Calor específico a volume constante.
d_θ	Passo do ângulo do virabrequim.
e_{RMS}	Erro quadrático médio da pressão estimada com relação a pressão medida.
$\mathbf{f}$	Função que representa o modelo de evolução.
f_{modelo}	Função que representa o modelo de combustão, Eq. (22).
$\mathbf{h}$	Função que representa o modelo de observação.
$h(\theta)$	Coeficiente de transferência de calor por convecção entre a parede do cilindro e a mistura ar-combustível.
K	Número total de instantes de tempo considerados na metodologia.
k	Índice relativo ao instante de tempo do problema inverso não-estacionário.
k_i	Fração da duração da combustão correspondente a fase i.
L	Comprimento da biela.
m	Constante ajustável da função de Wiebe.
m_{ar}	Massa do ar presente na câmara de combustão.
$\dot{m}_{\text{ar}}$	Vazão mássica total de ar que entra nos cilindros.
m_{comb}	Massa do combustível presente na câmara de combustão.
$\dot{m}_{\text{comb}}$	Vazão mássica total de combustível que entra nos cilindros.
m_{tot}	Massa total da mistura ar-combustível.
N	Frequência de rotação do motor.
N_{rep}	Número de vezes que o problema é resolvido para garantir convergência.

N_S	Número de partículas do filtro SIR.
$N_S{}^*$	Número de partículas do filtro SIR cujo peso é não-nulo.
$\mathbf{n}$	Vetor de ruído das medições.
n_{cil}	Número de cilindros do motor.
n_p	Expoente politrópico.
n_R	Número de rotações do virabrequim para um ciclo completo.
n_x	Número de elementos do vetor de estado.
n_z	Número de elementos do vetor de medições.
$P(\theta)$	Pressão na câmara de combustão.
$P_M(\theta)$	Pressão na câmara de combustão devido apenas ao ciclo motor.
$P_{\text{est}}^i(\theta_k)$	Pressão na câmara de combustão estimada da i-ésima partícula do filtro SIR no ângulo do virabrequim relativo ao k-ésimo instante de tempo.
$P_{\text{med}}(\theta_k)$	Pressão na câmara de combustão medida no ângulo do virabrequim correspondente ao k-ésimo instante de tempo.
PCI	Poder calorífico inferior do combustível.
Q	Energia total na forma de calor recebida pela mistura ar-combustível.
$Q_{\text{comb}}(\theta)$	Quantidade instantânea de calor liberada pelo combustível.
$Q_{\text{comb,T}}$	Quantidade total de calor a ser liberado pelo combustível durante sua queima.
$Q_p(\theta)$	Quantidade instantânea de calor transferido através das paredes do cilindro.
R	Constante dos gases ideais específica da mistura ar-combustível.
r_c	Razão de compressão.
S	Curso total do pistão.
SFC	Consumo específico de combustível.
$\bar{S}_p$	Velocidade média do pistão.
$s(\theta)$	Curso instantâneo do pistão.
$T(\theta)$	Temperatura da câmara de combustão.
T_p	Temperatura na parede do cilindro.
U	Energia interna total da mistura ar-combustível.
$V(\theta)$	Volume da câmara de combustão.
V_d	Volume deslocado do cilindro.
V_m	Volume morto do cilindro.
$\mathbf{v}$	Vetor de ruído de estado.

$v(\theta)$	Velocidade média da mistura ar-combustível.
W	Energia total na forma de trabalho exercido pela mistura ar-combustível.
$\dot{W}$	Potência do motor.
$\mathbf{W}_z$	Matriz de covariância dos erros das medições.
w_k^i	Peso da i-ésima partícula do filtro SIR no ângulo do virabrequim referente ao k-ésimo instante de tempo.
$\mathbf{x}$	Vetor de incógnitas / vetor de estado.
$x(\theta)$	Fração mássica instantânea de combustível queimado.
$\mathbf{z}$	Vetor de medições.

Símbolos Gregos

α_i	Fração da mássica de combustível queimado durante a fase i da combustão.
β_i	Parâmetros do método de Runge-Kutta de 4ª ordem.
γ	Razão dos calores específicos.
ε^i	Número randômico usado no modelo de *Random-Walk* para a i-ésima partícula.
$\Delta\theta$	Duração da combustão por variação do ângulo do virabrequim.
θ	Ângulo do virabrequim.
θ_0	Ângulo do virabrequim relativo ao instante inicial do problema inverso não-estacionário.
θ_K	Ângulo do virabrequim relativo ao instante final do problema inverso não-estacionário.
θ_{SOI}	Ângulo do virabrequim de início da injeção.
θ_{SOC}	Ângulo do virabrequim de início da combustão.
μ_i	Coeficientes da expressão polinomial para o calor específico a pressão constante.
σ_b	Parâmetro de tendência do modelo de *Random-Walk*.
σ_h	Passo do modelo de *Random-Walk*.
σ_{ini}	Desvio padrão usado para a estimativa inicial randômica da taxa de variação da fração mássica de combustível queimado.
$\sigma_{\mathrm{med}}(\theta_k)$	Desvio padrão das medições no ângulo do virabrequim correspondente ao k-ésimo instante de tempo.

1. Introdução

Atualmente, a principal fonte de potência em veículos automotivos consiste na liberação de energia ocorrida durante a queima de combustíveis realizada em motores de combustão interna. Os principais combustíveis usados nestes são os fósseis, isto é, aqueles advindos do petróleo, como a gasolina e o óleo diesel. A queima destes gera a emissão de poluentes causadores de diversos problemas ambientais que são alvo de preocupação da sociedade como a chuva ácida, no caso do NO_x, e o aumento da intensidade do efeito estufa, no caso do CO_2. Muitos poluentes, em especial os materiais particulados, ainda podem provocam vários problemas de saúde nas populações que abrangem desde doenças respiratórias até câncer (C.A.T.F., 2005). À vista desses problemas, há um crescente esforço da comunidade científica na busca de meios alternativos de geração de potência em veículos, como os motores elétricos. Entretanto, os ainda altos preços (DAPENA, 2009) destes comprometem a disseminação de seu uso e farão os motores de combustão interna manterem sua posição como principal fonte de energia em veículos por muitos anos ainda.

Para melhorar este quadro, é necessário buscar meios de reduzir os níveis de emissão de poluentes provenientes do processo de combustão. Uma das principais maneiras de o fazer é utilizando biocombustíveis os quais, em sua maior parte, possuem níveis de emissão menos prejudiciais ao ambiente e às populações do que aqueles advindos de combustíveis fósseis (DUTRA, 2014). O fato de o carbono emitido na combustão ser compensado pela absorção do mesmo no processo de fotossíntese das plantações cultivadas para a produção de biocombustíveis é uma enorme vantagem destes, pois não há o aumento da quantidade de carbono presente em seu ciclo natural.

Contudo, existem desvantagens econômicas e tecnológicas na utilização dos biocombustíveis quando comparados aos combustíveis fósseis, o que é refletido na manutenção do petróleo como principal fonte de energia primária do Brasil (M.M.E., 2014), vista na Figura 1, e do mundo (I.E.A., 2014). Este cenário ainda foi recentemente agravado pela redução histórica dos preços do barril de petróleo: $48,84 para o petróleo bruto WTI e $54,66 para o petróleo *Brent* (http://oil-price.net/, acessado dia 12/02/2015 às 15:00). À vista dessas desvantagens dos biocombustíveis, o seu uso na forma pura pode não ser algo benéfico. De forma a combinar às melhores emissões dos biocombustíveis e

o baixo custo dos combustíveis fósseis, tem-se pesquisado utilizar misturas de ambos em motores de combustão interna.

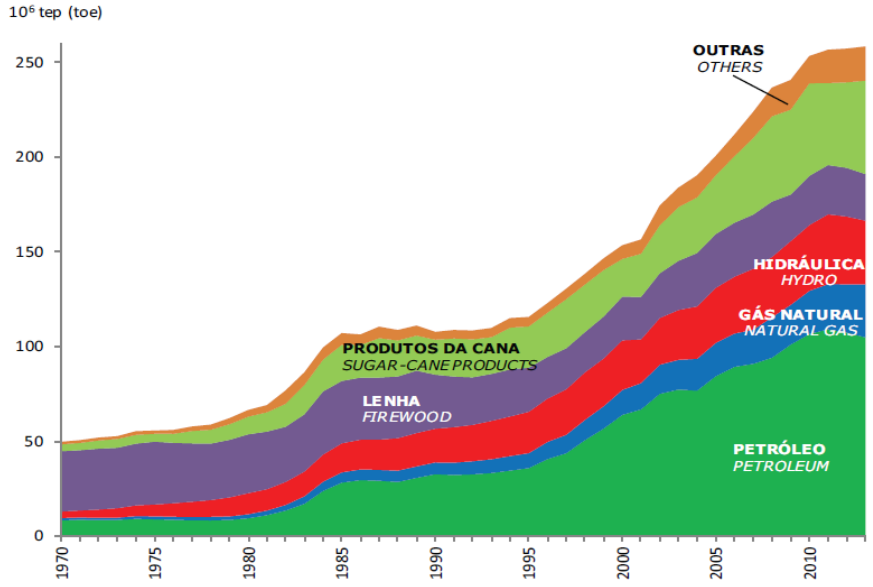

Figura 1 - Energia primária produzida no Brasil por fonte (M.M.E., 2014).

Para a avaliação da qualidade desses "novos" combustíveis, é necessária a elaboração de metodologias para o estudo do processo de combustão. Assim, será possível analisar quais parâmetros mais influenciam na emissão de poluentes e como melhorar a eficiência da combustão. É válido mencionar que um aumento desta é bom tanto para os fabricantes do motor e do combustível, devido ao aumento da vantagem competitiva de seus produtos, quanto para os consumidores, pois mais potência será gerada a partir da mesma quantidade de combustível.

O processo de combustão é usualmente estudado pela análise da evolução da taxa de liberação de calor pelo combustível em função do tempo, expresso como variação do ângulo do virabrequim do motor (HEYWOOD, 1988). Ela é obtida, na maior parte dos trabalhos contidos na literatura, por correlações empíricas ou semi-empíricas calibradas com resultados experimentais obtidos em ensaios do motor, normalmente a pressão no interior do cilindro, isto é, a pressão na câmara de combustão. Esta calibração é intermediada por modelos de combustão que necessitam de tais correlações para o fechamento de seus sistemas de equações. A natureza empírica dessas correlações compromete a capacidade de predição das metodologias usadas, o que é desfavorável para o estudo da combustão.

Em paralelo a isso, a resolução de problemas inversos pela abordagem Bayesiana tem se mostrado uma forte ferramenta para o estudo de parâmetros que muitas vezes não podem ser medidos. Uma classe de problemas inversos muito importante cuja solução tem sido alvo de inúmeros trabalhos na literatura são os problemas de estimativa de estado, também conhecidos como problemas inversos não-estacionários (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Eles são encontrados em diversos campos da ciência, como na localização de aeronaves, na economia e na propagação de doenças. Também são constantemente usados em estudos na área da engenharia térmica e, recentemente (HAMILTON *et al.*, 2014, ESTUMANO *et al.*, 2014a), começaram a ser formulados para o estudo da termodinâmica da combustão em motores.

1.1. Objetivo e Metas

O objetivo deste trabalho consiste no estudo da combustão de um motor marítimo diesel localizado no Laboratório de Máquinas Térmicas da Escola Politécnica/COPPE (Universidade Federal do Rio de Janeiro). Para isso, a meta do trabalho é a estimativa Bayesiana da taxa de liberação de calor pelo combustível deste motor, feita pela formulação de um problema inverso não-estacionário e sua solução por inversão estatística. Através desta, será possível observar as diversas fases da combustão e os momentos de início de cada uma.

Neste trabalho, serão usados os dados experimentais de pressão na câmara de combustão do motor em questão operando com óleo marítimo diesel para quatro cargas diferentes (25%, 50%, 75% e 100%). Além disso, um modelo de combustão simplificado será usado no problema inverso não-estacionário e um filtro de partículas Bayesiano será formulado e aplicado para a resolução deste problema inverso. Os resultados (taxa de liberação de calor e pressão) da metodologia deste trabalho serão comparados com aqueles obtidos pela metodologia tradicional. Esta é o problema direto relativo ao problema inverso formulado e consiste no uso de um modelo de combustão acoplado com uma correlação de natureza empírica ajustada. Por fim, a metodologia deste trabalho será validada pela comparação do ângulo do virabrequim no qual a combustão inicia determinado a partir da curva estimada de taxa de liberação de calor com os que foram determinados por diversas técnicas que utilizam as curvas experimentais de pressão.

1.2. Organização do Trabalho

Na Seção 2 do trabalho, primeiro serão apresentados os fundamentos teóricos da combustão em motores diesel devido à importância deste tema para o trabalho. Em seguida, diversos trabalhos sobre tópicos relevantes serão revisados. Na Seção 3, a metodologia usada para a estimativa da taxa de liberação de calor será descrita: o modelo de combustão será apresentado, o problema inverso não-estacionário será formulado, será descrito o método de solução, isto é, o filtro de partículas Bayesiano, e o algoritmo final. Na Seção 4, a bancada experimental e os ensaios do motor marítimo, cuja combustão este trabalho deseja estudar, serão descritos juntamente com o levantamento dos principais parâmetros do motor necessários para a metodologia. Na Seção 5, os resultados do trabalho serão apresentados e discutidos. Primeiro, os ângulos de início da combustão determinados com várias técnicas que usam as curvas experimentais de pressão serão exibidos e, em seguida, será avaliada a influência de parâmetros da metodologia nos resultados de pressão e de taxa de liberação de calor. Posteriormente, os resultados serão comparados com os obtidos pela metodologia tradicional e serão comparados também os ângulos de início da combustão obtidos anteriormente com aqueles obtidos com as curvas estimadas de taxa de liberação de calor. No fim da Seção 5, analisa-se as fases da combustão observadas na curvas obtidas através da estimativa Bayesiana. Na Seção 6, serão apresentadas as principais conclusões e observações deste trabalho para, na Seção 7, por fim, as referências bibliográficas usadas neste serem listadas.

2. Revisão Bibliográfica e Estado da Arte

Nesta seção, serão revisadas publicações sobre tópicos importantes ao trabalho e que serão utilizados na elaboração e validação da metodologia. Primeiro, será explicada, conforme importantes referências da literatura, os fundamentos da combustão em motores diesel, com foco no caso de motores de ciclos de quatro tempos (admissão-compressão-expansão-exaustão). Em seguida, será apresentado o estado da arte e a revisão bibliográfica de trabalhos sobre modelagem da combustão em motores, técnicas de determinação do ângulo do virabrequim de início da combustão e de abordagem Bayesiana de problemas inversos.

2.1. Fundamentos da Combustão em Motores Diesel

Conforme descrito por HEYWOOD (1988), no processo de combustão em motores de ignição por compressão, ou motores diesel, o combustível líquido é primeiramente injetado na câmara de combustão por um sistema de injeção no final do tempo de compressão e pouco antes do início da desejada queima do combustível, isto é, sua combustão. Na ponta do injetor, há pequenos bocais e orifícios pelos quais o combustível líquido passa em alta velocidade ao ser injetado, desintegrando o jato de combustível e atomizando-o em pequenas gotículas que entram na câmara de combustão. Com isso, aquelas vaporizam e o vapor de combustível se mistura com o ar da câmara de combustão. Observa-se que ambos os processos são facilitados pelo aumento da área de contato entre o ar e o combustível causado por sua atomização. São iniciadas então, diversas reações químicas entre o combustível, o ar da câmara de combustão e os gases residuais da combustão do ciclo anterior, denominadas reações pré-combustão (HEYWOOD, 1988).

Entretanto, devido às altas temperaturas da câmara de combustão, algumas porções do combustível entram em combustão espontânea. Com isso, ocorre a formação de uma frente de chama que irá avançar continuamente sobre às porções da mistura ar-combustível ainda não queimadas. Em paralelo a isso, o combustível continua a ser injetado na câmara de combustão até atingir a quantidade desejada. Para esta nova quantidade de combustível injetado, o tempo de vaporização será bem menor que para as

primeiras porções de combustível, devido ao aumento da temperatura da câmara de combustão, provocada pelo aparecimento da chama.

Aquilo que foi anteriormente descrito resume o processo de combustão em motores diesel. A seguir, alguns aspectos mais específicos serão explicados, como os tipos de sistemas de injeção de combustível e as fases da combustão.

2.1.1. Tipos de Sistemas de Injeção de Combustível

Em motores diesel, existem dois tipos de sistemas de injeção de combustível na câmara de combustão (HEYWOOD, 1988): sistemas de injeção direta (DI) e sistemas de injeção indireta (IDI). Os sistemas DI possuem uma câmara de combustão aberta, enquanto os sistemas IDI possuem uma câmara de combustão dividida da qual fazem parte uma pré-câmara, onde o combustível é inicialmente injetado, e uma câmara principal, para onde o combustível segue posteriormente, conectada àquela via um ou mais orifícios ou um bocal (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). Os sistemas DI são mais comuns em motores de médio e grande porte e os sistemas IDI são exclusivos de motores pequenos (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). Em ambos os motores DI e IDI, a injeção se inicia quando a agulha do bico injetor, componente do sistema de injeção, levanta e termina quando ela volta a sua posição de origem.

2.1.2. Fases da Combustão em Motores Diesel DI

O processo de combustão em motores diesel DI e cada uma de suas fases pode ser facilmente visualizado através da curva da taxa de liberação de calor pelo combustível em função do ângulo do virabrequim, conforme visto na Figura 2. Esta, onde SOI (*Start Of Injection*) representa o ângulo de início da injeção de combustível na câmara de combustão e EOI (*End Of Injection*) o ângulo de fim da injeção, distingue claramente quatro fases do processo de combustão (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). São elas:

- Fase I: Atraso de ignição;
- Fase II: Combustão pré-misturada ou combustão rápida (*rapid combustion*);
- Fase III: Combustão difusiva ou combustão controlada pela taxa de mistura (*mixing-controlled combustion*);
- Fase IV: Combustão terminal ou combustão residual.

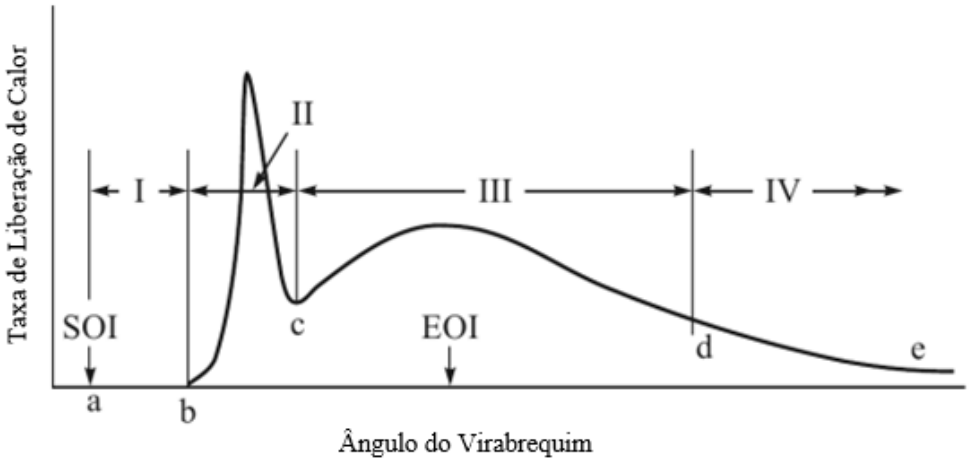

Figura 2 - O processo de combustão em motores diesel DI e suas diferentes fases, adaptado de GUPTA (2013).

O atraso de ignição (Fase I) é definido como o intervalo de tempo, ou variação do ângulo de virabrequim, entre o início da injeção e o início da combustão (HEYWOOD, 1988). Na literatura, também pode ser chamado de atraso do crescimento da pressão (HARDENBERG e HASE, 1979). Ele é resultado de processos físicos e químicos que ocorrem antes da queima do combustível e que demoram um certo tempo para acontecer, alguns deles já citados anteriormente. Os processos físicos são: a atomização do jato de combustível e formação de suas gotículas, o aquecimento destas e sua vaporização, e a mistura do ar da câmara de combustão com o combustível vaporizado (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). Por sua vez, os processos químicos consistem nas reações de pré-combustão, podendo-se citar ainda, para combustíveis fósseis, a decomposição dos hidrocarbonetos mais pesados em componentes mais leves (GUPTA, 2013). Os processos físicos e químicos não ocorrem isoladamente em intervalos de tempo separados, mas sim concomitantemente e influenciando um ao outro (GUPTA, 2013). Entretanto, é observado que, nas primeiras frações do atraso de ignição, os processos físicos ocorrem com maior intensidade, enquanto, nas outras frações, os processos químicos dominam (GUPTA, 2013). Existem diversos fatores de operação do motor que afetam o atraso de ignição, como o avanço de injeção, a carga do motor, a rotação do virabrequim e a taxa de injeção (HEYWOOD, 1988). Fatores relacionados à estrutura química dos combustíveis também são agentes importantes no atraso de ignição, pois aqueles compostos por cadeias parafínicas lineares (alcanos) entram em ignição mais facilmente

que combustíveis com cadeias aromáticas e de modo bastante mais fácil que aqueles que possuem cadeias ramificadas (HEYWOOD, 1988).

A combustão pré-misturada (Fase II) consiste na queima rápida e espontânea, durando apenas alguns graus do ângulo do virabrequim, do combustível que se misturou com o ar da câmara de combustão durante o período de atraso de ignição (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). Portanto, quanto maior for este, mais combustível terá se misturado com o ar e mais intensa será a combustão pré-misturada. Esta é caracterizada por uma grande taxa de variação da pressão em função do ângulo do virabrequim e, quanto mais intensa a queima pré-misturada de combustível for, maior também será aquela. Um pico na taxa de variação (derivada) da pressão significa uma aplicação espontânea de carga na estrutura do motor, podendo levar à falha por fadiga em casos mais graves, e causando um ruído semelhante àquele provocado pela autoignição do combustível em motores Otto (GUPTA, 2013). Um alto valor da pressão, e consequentemente da temperatura, ainda provoca aumento nos níveis de emissão de NO_x e uma grande dilatação térmica dos componentes do motor, podendo levar ao aparecimento de tensões térmicas (GUPTA, 2013). Devido a esses problemas, combustíveis que possuem um grande atraso de ignição e, consequentemente, uma combustão pré-misturada mais intensa durante sua queima, são ditos de má qualidade de ignição (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013).

Na Fase III, após as porções de combustível que se misturaram com o ar durante o atraso de ignição terem queimado durante a combustão pré-misturada, a chama formada irá avançar sobre qualquer nova quantidade de combustível que se misturar com o ar, queimando-a (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). Este tipo de combustão é denominado combustão difusiva. Portanto, a taxa de queima do combustível nesta fase da combustão é governada pela taxa de mistura entre o combustível e o ar, fazendo com que a combustão difusiva seja mais lenta e menos intensa do que a combustão pré-misturada (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). A taxa de mistura é influenciada, entre outros, pela intensidade da turbulência na câmara de combustão (HEYWOOD, 1988, KUMAR *et al.*, 2013) e pela taxa de injeção de combustível na câmara de combustão (GUPTA, 2013), que ainda ocorre paralelamente à combustão difusiva, conforme observado na Figura 2.

A combustão terminal (Fase IV), também chamada de “cauda da combustão”, ocorre ao longo do final do tempo de expansão e é responsável pela queima das últimas parcelas de combustível (HEYWOOD, 1988, GUPTA, 2013). Este processo ocorre a

taxas muito menores que a combustão pré-misturada e a combustão difusiva (HEYWOOD, 1988).

2.2. Modelagem da Combustão em Motores Diesel

Os objetivos dos modelos existentes de combustão são a predição de seus principais parâmetros (eficiência, potência, emissões, etc) sob diversas condições operacionais, o estudo da influência de diferentes variáveis no processo de combustão e, consequentemente, a promoção de um melhor entendimento da física envolvida neste.

Para atingir esses objetivos, uma grande variedade de modelos de combustão em motores foi proposta na literatura desde a disseminação de seu uso da década de 1960, conforme RAMOS (1980) afirma. HEYWOOD (1988) classificou esses modelos em dois tipos básicos:

- Modelos termodinâmicos (ou fenomenológicos);
- Modelos fluidodinâmicos (ou multidimensionais).

Os modelos termodinâmicos são aqueles que se baseiam na análise termodinâmica dos fluidos de trabalho do motor, isto é, da mistura ar-combustível da câmara de combustão (HEYWOOD, 1988). São usualmente construídos com base na conservação global de energia (Primeira Lei da Termodinâmica) e possuem o tempo como única variável independente (HEYWOOD, 1988). Neles, a fração mássica de combustível queimada é descrita por um submodelo empírico ou semi-empírico. Outros diversos submodelos podem ser acoplados aos modelos termodinâmicos para melhorar a descrição do processo de combustão, como submodelos de transferência de calor ou de emissões (HEYWOOD, 1988, KUMAR *et al.*, 2013). Os modelos termodinâmicos são divididos em zero-dimensionais (ou de uma zona) e quasi-dimensionais (ou multizona) (HEYWOOD, 1988). Os modelos quasi-dimensionais se diferenciam dos modelos zero-dimensionais por terem mais informações da geometria do processo de combustão, como o formato do *spray* de combustível injetado na câmara de combustão em motores diesel (HEYWOOD, 1988). Essas informações a mais se devem à divisão do volume de controle em diversas zonas, cada uma com sua própria equação de conservação de energia (HEYWOOD, 1988). Os modelos zero-dimensionais encontram sua maior utilização, devido a sua simplicidade, no auxílio no projeto do motor, onde são usados em conjunto com dados experimentais, em especial os de pressão na câmara de combustão (RAMOS,

1980, KUMAR *et al.*, 2013). Entretanto, os modelos quasi-dimensionais descrevem melhor a física do processo de combustão, embora menos utilizados (HEYWOOD, 1988).

Conforme HEYWOOD (1988), os modelos fluidodinâmicos, ou multidimensionais, utilizam equações de conversação de energia, de quantidade de movimento (equações de Navier-Stokes), de massa e de espécies químicas. São utilizados ainda submodelos para a descrição da turbulência, das reações químicas, da quebra e evaporação das gotículas de combustível, entre outros. Embora descrevam muito melhor o processo de combustão que os modelos termodinâmicos, a correta seleção da malha utilizada para a discretização das equações de conservação é um dos desafios desse tipo de modelagem.

2.2.1. Modelos Zero-Dimensionais em Motores Diesel

ARRÈGLE *et al.* (2003a) e ARRÈGLE *et al.* (2003b) desenvolveram um modelo termodinâmico zero-dimensional de combustão para a identificação e quantificação da influência de parâmetros de injeção e condições de operação na taxa de liberação de calor pelo combustível no processo de combustão em motores diesel. Seus trabalhos priorizaram a análise das fases difusiva e terminal da combustão através da elaboração de um modelo simples que expressa de forma direta a relação entra a taxa de liberação de calor dessas fases com as condições de operação e de injeção. À vista disso, ao invés da aplicação da Primeira Lei da termodinâmica, eles usaram o conceito de Tempo Aparente de Combustão (ACT) para caracterizar as fases de interesse da combustão. ARRÈGLE *et al.* (2003a) modelaram uma das partes da combustão difusiva, denominada por eles como quasi-estacionária, e ARRÈGLE *et al.* (2003b), por sua vez, modelaram a outra fração da combustão difusiva, referida como transiente inicial, e também a combustão terminal, a qual eles denominam combustão difusiva transiente final. O modelo desenvolvido foi validado com dados experimentais tomados em ensaios de dois motores diesel monocilíndricos, cada um equipado com um turbocompressor. Com isso, os autores dos trabalhos identificaram explicitamente a influência da taxa de injeção, da massa específica instantânea do ar da câmara de combustão, da concentração de oxigênio e do diâmetro do bico injetor na taxa de calor liberada.

Entretanto, esse tipo de modelagem é altamente empírica e não captura a física do problema tão bem quanto os modelos termodinâmicos zero-dimensionais baseados na Primeira Lei da Termodinâmica. No trabalho de DESCIEUX e FEIDT (2007), um modelo

deste tipo foi desenvolvido para o estudo da influência de parâmetros envolvidos na combustão, na eficiência e na potência de motores diesel. Na equação de conservação de energia, foram considerados o calor liberado pelo combustível assim como o calor perdido através das paredes do cilindro e por fricção. DESCIEUX e FEIDT (2007) constataram que a temperatura da parede do cilindro tem pouca influência na eficiência e na potência do motor. Além disso, foi determinado que a razão curso-diâmetro do cilindro influencia significativamente a potência e que o ângulo de início da combustão afeta bastante a eficiência do motor.

Os modelos termodinâmicos zero-dimensionais baseados na Primeira Lei da Termodinâmica podem englobar diversos efeitos físicos além da perda de calor através das paredes do cilindro e das perdas por fricção, conforme realizado por DESCIEUX e FEIDT (2007), com o objetivo de aumentar sua precisão. PAYRI *et al.* (2011) desenvolveram um modelo bastante completo desse tipo para motores diesel DI, levando em consideração diversos fenômenos. Eles utilizaram submodelos para a transferência de calor através das paredes, para a vazão mássica através das folgas entre o pistão e o cilindro (vazão de *blowby*), para a vazão de combustível injetada, para o cálculo das propriedades da mistura da câmara de combustão e para a determinação da dilatação térmica desta como consequência das altas temperaturas alcançadas durante a combustão. Seu modelo foi validado usando experimentos feitos para um motor diesel DI turbocomprimido de alta rotação com quatro cilindros.

Além dos parâmetros anteriormente citados, as emissões se apresentam como outro alvo de estudo dos modelos termodinâmicos zero-dimensionais baseados na Primeira Lei da Termodinâmica, conforme fizeram SCAPPIN *et al.* (2012). Eles acoplaram ao modelo um mecanismo estendido de Zeldovich contido na literatura para o cálculo dos níveis de emissão de NO_x e os avaliaram juntamente com a eficiência da combustão. O modelo foi validado usando dados experimentais referentes a dois motores marítimos diesel de dois tempos e de baixa rotação.

AWAD *et al.* (2013) implementaram um modelo termodinâmico zero-dimensional baseado na Primeira Lei da Termodinâmica para a predição da pressão na câmara de combustão e das características da combustão em motores diesel operando com diferentes combustíveis. Além de modelar a taxa de liberação de calor pelo combustível, AWAD *et al.* (2013) ainda usaram submodelos para a descrição das vazões de admissão e de exaustão, do atraso de ignição e da transferência de calor através das paredes do cilindro, possibilitando uma boa caracterização de todas as fases da combustão. O modelo

foi calibrado usando resultados experimentais de um motor diesel de quatro tempos DI monocilíndrico e estacionário operando com misturas de diesel e biodiesel de resíduos orgânicos. Por fim, AWAD *et al.* (2013) utilizaram o modelo validado para prever a combustão no mesmo motor operando apenas com biodiesel feito a partir de gordura animal.

2.2.2. Modelos Quasi-Dimensionais em Motores Diesel

SAHIN e DURGUN (2008) desenvolveram um modelo termodinâmico quasi-dimensional para a predição teórica das características dos ciclos e da performance de motores diesel DI. Na elaboração do modelo, detalhes da formação do *spray* de combustível, do processo de mistura do combustível com o ar da câmara de combustão, da turbulência e da transferência de calor foram levados em conta. Além disso, um modelo de emissões de NO, baseado no equilíbrio químico e cinética das reações envolvidas, foi acoplado ao modelo para o estudo da concentração de poluentes em cada uma das zonas e em toda câmara de combustão. Para a maior parte dos resultados do modelo, uma boa concordância com os dados experimentais foi obtida, exceto para os casos em que SAHIN e DURGUN (2008) argumentam que parâmetros que não foram levados em conta no modelo, como a interação do jato de combustível com a parede do cilindro e a presença de gases residuais, possuem papel importante.

RAO e HONNERY (2013) utilizaram dois diferentes submodelos de formação de NO_x acoplados com um modelo termodinâmico quasi-dimensional para o cálculo dos níveis de emissão daqueles. Diversos fenômenos físicos foram considerados em seu modelo, como a evolução do *spray*, a evaporação de combustível, a mistura do ar com o vapor de combustível e a formação dos produtos da combustão, entre eles o NO_x. Resultados de emissões de NO_x foram obtidos com o modelo quasi-dimensional para um motor diesel DI naturalmente aspirado de quatro cilindros. Os resultados de cada um dos submodelos de formação de NO_x foram comparados com dados experimentais e as condições operacionais nas quais cada um dos modelos apresenta mais sucesso foram discutidas.

NESHAT e SARAY (2014) desenvolveram um modelo termodinâmico quasi-dimensional para a simulação de motores de ignição por compressão (diesel) e de carga homogênea (*Homogeneous Charge Compression Ignition* - HCCI). No modelo, o volume de controle foi dividido em quatro zonas: zona principal (centro da câmara de combustão),

zona da camada limite, zona das folgas entre o pistão e as paredes do cilindro e zona externa. Em cada uma delas, a Primeira Lei da Termodinâmica e as equações de cinética química foram resolvidas simultaneamente. No modelo, ainda foram consideradas a transferência de calor por condução entre as zonas, a transferência de calor por convecção entre a zona de camada limite e as paredes do cilindro e a transferência de massa entre as zonas. O modelo foi validado usando dados experimentais de um motor diesel monocilíndrico padrão Waukesha CFR para dois combustíveis: heptano e metano. Na validação, os resultados comparados foram a pressão na câmara de combustão e as emissões de NO_x, CO e hidrocarbonetos não-queimados.

SAVVA e HOUNTALAS (2014) aplicaram um modelo termodinâmico quasi-dimensional simplificado acoplado com um submodelo que prevê a formação de NO_x para o estudo de emissões em motores marítimos diesel. O modelo dividiu a câmara de combustão entre uma zona "queimada" e outra "não-queimada" e definiu submodelos para a evolução de cada uma, acoplados com a Primeira Lei da Termodinâmica e com equações de cinética química. A calibração e validação do modelo foram feitas com os resultados de emissão de NO_x de 84 casos testes de 16 motores marítimos diesel diferentes, tanto de dois tempos como de quatro tempos. O desvio máximo entre os resultados experimentais e os calculados pelo modelo foi de 10%, após sua calibração.

2.2.3. Modelos Multidimensionais em Motores Diesel

RAKOPOULOS *et al.* (2011) desenvolveram um modelo multidimensional, para investigar como as folgas entre o pistão e a parede do cilindro afetam a pressão da câmara de combustão, a temperatura da câmara de combustão e o campo de velocidades do fluido nesta. No modelo, simples submodelos propostos nesse mesmo trabalho simularam a transferência de calor e de massa através das folgas. A validação do modelo foi feita utilizando dados experimentais de pressão da câmara de combustão de um motor diesel monocilíndrico de quatro tempos operando em quatro condições diferentes. Em seguida, a validação foi estendida para um motor Otto. RAKOPOULOS *et al.* (2011) constataram que o campo de velocidade e a energia cinética turbulenta na câmara de combustão são afetados pela modelagem das folgas somente perto da face superior do pistão, sendo algo desprezível para perto do cabeçote do cilindro. Também, foi observado que as propriedades termodinâmicas da mistura da câmara de combustão são afetadas pela

transferência de calor e massa através das folgas, o que também influencia o pico de pressão e causa maiores flutuações na temperatura.

LI *et al.* (2013) utilizaram um modelo multidimensional para investigar os efeitos da fração mássica de metanol, do ângulo de início da combustão e da temperatura inicial, isto é, a temperatura no fechamento da válvula de admissão, nas características da combustão e nos níveis de emissão em um motor ignição por compressão (diesel) de reatividade controlada (*Reactivity Controlled Compression Ignition* - RCCI) operando com metanol e diesel. No modelo usado, foram aplicados submodelos para descrever a turbulência, a colisão e quebra de gotículas, a interação entre o *spray* de combustível e as paredes do cilindro, a transferência de calor através das paredes do cilindro, as reações de combustão, e a formação de particulados e NO_x. No motor usado no trabalho de LI *et al.* (2013), o metanol é inserido na câmara de combustão através da admissão, já estando pré-misturado com o ar, enquanto o diesel é inserido de forma direta (DI). No trabalho de LI *et al.* (2013), foi definido um número de cetano da mistura como a média dos números de cetano dos componentes do combustível ponderada por suas frações molares, o que cria uma distribuição espacial do número de cetano, já que, quando dois combustíveis diferentes são usados, sua mistura não será homogênea pela câmara de combustão. Dentre os resultados mais interessantes do trabalho, se destacam o fato de tanto a adição de metanol ao diesel quanto o ângulo de início da combustão afetarem significativamente a distribuição do número de cetano na câmara de combustão e o fato da adição de metanol reduzir todos os níveis de emissão de poluentes (NO_x, particulado, etc).

MOHAN e HAWORTH (2014) utilizaram um modelo multidimensional de combustão para investigar a influência das flutuações turbulentas de composição e de temperatura (*turbulence-chemistry interactions* - TCI) na taxa de calor liberado pelo combustível, na estrutura da chama e nas emissões de um motor diesel. Para a discretização das equações de conversação, isto é, para a geração da malha, um método híbrido Lagrange-Euleriano foi usado. No modelo, um mecanismo químico complexo foi usado para simular a química do combustível queimado e submodelos semi-empíricos foram utilizados para a estimativa dos níveis de emissões de NO_x, particulado, CO e hidrocarbonetos não-queimados. MOHAN e HAWORTH (2014) constataram que as flutuações turbulentas na composição e na temperatura de fato afetam os parâmetros anteriormente mencionados e que, quando aquelas são consideradas, a concordância com os dados experimentais se torna consideravelmente mais satisfatória.

2.3. Técnicas para a Identificação do Início da Combustão

Existem inúmeras técnicas publicadas na literatura para a identificação do ângulo do virabrequim em que a ignição ocorre, isto é, o ângulo de início da combustão, que podem ser utilizadas tanto para motores diesel quanto para motores Otto. Uma delas é consiste na utilização de sensores óticos de luminosidade instalados dentro da câmara de combustão para a detecção do aparecimento da chama. Entretanto, esta técnica pode não apresentar bons resultados. O principal motivo que HEYWOOD (1988) utiliza para justificar isso é o fato do aparecimento da chama se dar após o incremento da pressão na câmara de combustão causado pelo início da combustão. Entretanto, um trabalho recente (PAYRI *et al.*, 2012) utilizou esta técnica e constatou sua boa concordância com os resultados de outras. BODISCO *et al.* (2013) levantou a possibilidade de isso ser devido à evolução tecnológica destes sensores ter mitigado o problema descrito por HEYWOOD (1988). Entretanto, os altos preços desses sensores de luminosidade ainda é uma grande desvantagem deste método e que motiva a exploração de outros.

As técnicas mais utilizadas na literatura são aquelas baseadas na curva da taxa de liberação de calor pelo combustível em função do ângulo do virabrequim (HEYWOOD, 1988). A partir desta curva, adota-se um critério para identificar o ângulo de início da combustão, como o ângulo de maior inclinação da curva (HEYWOOD, 1988) ou o ângulo em que ela passa de valores negativos para positivos (LATA e MISRA, 2011). Nesta técnica, é comum que a taxa de liberação de calor pelo combustível seja determinada através de dados experimentais de pressão na câmara de combustão em função do ângulo do virabrequim e da aplicação da Primeira Lei da Termodinâmica, de modo muito similar ao que é feito em modelos termodinâmicos zero-dimensionais. Podemos notar que essa técnica é altamente dependente da representatividade física da maneira como o balanço energético do volume de controle da câmara de combustão foi feito. À vista disso, a utilização direta dos dados experimentais de pressão se mostra uma forma mais promissora de se encontrar o início da combustão.

A utilização das curvas experimentais de pressão com esse objetivo é bastante difundida na literatura, com inúmeros critérios e técnicas existentes. Uma das mais difundidas delas é a técnica que identifica o ângulo de início da combustão como aquele em que a derivada segunda da pressão em relação ao ângulo do virabrequim possui um máximo local (LATA e MISRA, 2011, ROTHAMER e MURPHY, 2013). KATRASNIK *et al.* (2006) propôs uma técnica que identifica o ângulo de início da combustão como

aquele em que a derivada terceira da pressão tem um máximo local. Outro critério é aquele que identifica o mínimo local da curva da derivada do logaritmo natural da pressão como o ângulo de início da combustão (ZERVAS, 2005). Assumindo o tempo de compressão do motor como um processo politrópico, YOUNG e LIENESCH (1978) utilizaram a técnica que identifica o ângulo de início da combustão como aquele em que o processo deixa de ser politrópico, isto é, o expoente politrópico deixa de ser constante. Este é o coeficiente angular da curva do logaritmo natural da pressão *vs.* logaritmo natural do volume, o que torna fácil a aplicação do critério de YOUNG e LIENESCH (1978) através da identificação do momento em que a curva deixa de ser uma reta. Uma abordagem diferente foi utilizada por BODISCO *et al* (2013) que usou um modelo estatístico Bayesiano que identifica o início da combustão como o ângulo em que os dados de pressão filtrados por um filtro passa-faixa se afastam do ruído ambiente e a ressonância da combustão começa.

A maior parte das técnicas e critérios para a determinação do início da combustão foram elaborados originalmente para motores Otto e não para motores diesel. Entretanto, o início da combustão nessas duas famílias de motores é semelhante, pois a combustão em motores Otto é pré-misturada e, como foi dito em páginas anteriores, a primeira fase da combustão em motores diesel também é pré-misturada. Portanto, as técnicas em sua maior parte podem ser utilizadas para qualquer um desses motores.

Diversos trabalhos compararam diferentes técnicas e critérios para a identificação do ângulo de início da combustão. ZERVAS (2005) aplicou sete técnicas diferentes que usam como base ou a curva experimental de pressão ou a curva da taxa de liberação de calor pelo combustível, com o objetivo final de estimar o atraso de ignição e a duração da combustão. Dentre as técnicas usadas, se destacam aquelas que identificam o momento do início da combustão como aquele em que um determinado parâmetro passa a ser diferente no ciclo com combustão e ciclo motor. Cada técnica utilizou um parâmetro diferente: pressão, taxa de variação desta, expoente politrópico e sua taxa de variação. Para completar, a técnica do logaritmo anteriormente descrita foi usada juntamente com a técnica de HEYWOOD (1988) que usa a curva da taxa de liberação de calor e a técnica de YOUNG e LIENESCH (1978). ZERVAS (2005) comparou os resultados e a aplicação de cada critério e constatou que aqueles que utilizam o ciclo motor como referência são desvantajosos pois muitas vezes este não está disponível e deve ser modelado.

ROTHAMER e MURPHY (2013) determinaram experimentalmente o atraso de ignição de um motor diesel operando com óleo diesel e com combustíveis que são

comumente usados em jatos, como o *jet-A2* e uma mistura de *jet-A* com querosene isoparafínico. Para o cálculo do atraso de ignição, foi necessário determinar antes o ângulo de início da combustão, o que eles fizeram com seis critérios diferentes. A identificação do momento em que a pressão atinge 50% do seu valor máximo obtido na fase pré-misturada da combustão como ângulo de início da combustão e a caracterização deste como o momento em que a taxa de liberação de calor atinge 10% de seu valor máximo na fase pré-misturada estão entre as sete técnicas utilizadas. ROTHAMER e MURPHY (2013) ainda usaram as técnicas da derivada segunda da pressão e da derivada terceira, anteriormente descritas. Foi observado que a técnica mais satisfatória foi aquela em que o ângulo de início da combustão é obtido pela extrapolação da inclinação máxima da curva de pressão até a base no gráfico.

PASQUALETTE *et al.* (2014) usaram quatro técnicas diferentes para a determinação do início da combustão e uma técnica fixa para a identificação do início da injeção para a estimativa do atraso de ignição de um motor marítimo diesel operando com óleo diesel marítimo. Para o início da combustão, as técnicas utilizadas foram: a da derivada segunda da pressão, a da derivada terceira da pressão, a do logaritmo natural da pressão e a do expoente politrópico (YOUNG e LIENESCH, 1978). O atraso de ignição fio calculado para quatro cargas de operação diferentes do motor (25%, 50%, 75% e 100%) e os resultados obtidos com cada uma das técnicas anteriormente citadas foram comparados. PASQUALETTE *et al.* (2014) constataram que as técnicas da derivada segunda da pressão, da derivada terceira e do logaritmo natural da pressão proveram resultados equivalentes, enquanto a técnica do expoente politrópico obteve resultados um pouco divergentes das outras três técnicas.

2.4. Abordagem Bayesiana de Problemas Inversos

A resolução de problemas inversos através da teoria de inversão estatística (KAIPIO e SOMERSALO, 2004), isto é, através de uma abordagem Bayesiana, é um tema de pesquisa em crescimento no campo da engenharia térmica, com destaque para problemas de transferência de calor (KAIPIO e FOX, 2011). Diversos trabalhos que usaram essa estratégia para solucionar problemas inversos foram publicados.

ORLANDE *et al.* (2008) solucionaram um problema inverso de condução de calor com uma abordagem Bayesiana pelo método de Monte Carlo com cadeias de Markov

(*Markov Chain Monte Carlo* – MCMC), implementado na forma do algoritmo de Metropolis-Hastings (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Os valores de temperatura obtidos pela resolução do problema direto foram usados como medições na análise inversa, com as devidas adaptações para evitar "crimes inversos" (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Os parâmetros estimados com esta abordagem foram precisos e estáveis mesmo com a presença de erros randômicos nas medições, artificialmente gerados.

SILVA *et al.* (2010) compararam o uso de cinco diferentes filtros de partículas para a resolução de um problema inverso não-estacionário (KAIPIO e SOMERSALO, 2004) com a abordagem Bayesiana. O problema físico consiste na resolução da equação de condução de calor unidimensional aplicada em um meio semi-infinito. O problema direto foi resolvido por diferenças finitas para fornecer medições artificiais de temperatura com um ruído experimental composto por números randômicos, aditivos e distribuição Gaussiana. O problema inverso tem como objetivo a estimativa do fluxo de calor usado como condição de contorno no problema direto. SILVA *et al.* (2010) constataram que o filtro que obteve os melhores resultados foi o ASIR (PITT e SHEPARD, 1999).

SILVA *et al.* (2011) aplicaram dois diferentes filtros de partículas, o SIR (GORDON *et al.*, 1993) e o ASIR, em um problema inverso de solidificação para estimar a localização da fonte, bem como a intensidade da linha de dissipação de calor. Assim como em SILVA *et al.* (2010), o problema inverso foi formulado como um problema inverso não-estacionário com uma abordagem Bayesiana. Em seu estudo, ambos os filtros ASIR e SIR conseguiram prever bem os parâmetros inversos de interesse, sendo o primeiro aquele que obteve resultados mais satisfatórios.

COLAÇO *et al.* (2012) utilizaram dois filtros sequenciais de Monte Carlo, isto é, filtros de partículas, o SIR e o ASIR para estimar o fluxo de calor na parede de uma cavidade quadrada contendo um líquido submetido a convecção natural. O problema inverso não-estacionário foi formulado com uma abordagem Bayesiana. Medições, contendo erros, tomadas nas fronteiras da cavidade foram utilizados no processo de estimativa. Diferentes tamanhos e padrões de malha foram utilizados na geração de resultados para os problemas direto e inverso para evitar "crimes inversos" (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Os resultados finais para o filtro ASIR foram mais satisfatórios que os mesmos do filtro SIR.

HAMILTON *et al.* (2014) utilizaram o filtro de partículas SIR para a estimativa no tempo do coeficiente de transferência de calor entre a parede do cilindro e a mistura ar-combustível da câmara de combustão durante o processo de combustão em um motor Otto. O problema direto consiste na resolução de um modelo termodinâmico zero-dimensional baseado na Primeira Lei da Termodinâmica de combustão para a obtenção da pressão na câmara de combustão. O problema inverso foi formulado em uma abordagem Bayesiana como um problema inverso não-estacionário. Para as estimativas, do coeficiente de transferência de calor, medidas sintéticas da pressão na câmara de combustão foram utilizados. A influência nos resultados do número de partículas usadas no filtro, da frequência de medição, dos erros de medição e das estimativas iniciais foi avaliada e resultados satisfatórios foram obtidos.

ESTUMANO *et al.* (2014a) estimaram a taxa de liberação de calor pelo combustível em um motor Otto com uma metodologia similar àquela usada por HAMILTON *et al.* (2014). O problema direto novamente consiste na solução de um modelo termodinâmico zero-dimensional de combustão baseado na Primeira Lei de Termodinâmica para a obtenção da pressão na câmara de combustão ao longo da queima do combustível. Para a obtenção da taxa de liberação de calor, foi formulado um problema inverso não-estacionário com uma abordagem Bayesiana que utilizou medidas sintéticas da pressão na câmara de combustão. O filtro SIR foi usado para a estimativa dinâmica de estados. Os resultados demonstraram que a metodologia usada é capaz de prever a taxa de liberação de combustível mesmo quando esta acontece de modo rápido e sem informações *à priori* sobre o processo de combustão.

3. Metodologia

Nesta seção do trabalho, será descrita a metodologia usada na estimativa Bayesiana da taxa de liberação de calor de um motor marítimo diesel. Primeiro, as correlações empíricas mais importantes contidas na literatura serão discutidas juntamente com as desvantagens e vantagens de seu uso. Em seguida, será deduzido um modelo de combustão a ser usado no problema inverso não-estacionário cuja teoria e formulação será apresentada *à posteriori*. O método de solução do problema será descrito que, neste trabalho, é o filtro SIR e, no fim da seção, será apresentado o algoritmo final usado para obter a taxa de liberação de calor.

3.1. Determinação da Taxa de Calor Liberada pelo Combustível

Conforme mencionado anteriormente, neste trabalho deseja-se estudar a combustão de um motor diesel através da análise da taxa de liberação de calor pelo combustível ao longo de sua queima. Assim, será possível determinar as características de cada uma das fases da combustão, como sua duração e o momento de seu início.

Sabe-se que a quantidade de energia que o combustível libera durante a combustão que ocorre dentro do cilindro após sua injeção pode ser determinada pelo Poder Calorífico Inferior (PCI), já que a água presente no produto da reação química está no estado vapor (HEYWOOD, 1988). Portanto, o calor total $Q_{comb,T}$ a ser liberado pelo combustível pode ser representado pela seguinte expressão, na qual supõe-se que a eficiência da combustão é de 100%:

$$Q_{\mathrm{comb,T}} = m_{\mathrm{comb}} PCI \tag{1}$$

onde m_{comb} é a massa de combustível presente na câmara de combustão. Entretanto, pretende-se expressar a quantidade de calor liberado pelo combustível ao longo do tempo, isto é, em função do ângulo do virabrequim. É possível expressar aquele parâmetro em função da fração mássica de combustível queimado, $x(\theta)$:

$$Q_{\mathrm{comb}}(\theta) = Q_{\mathrm{comb,T}} x(\theta) \tag{2}$$

onde θ é o ângulo do virabrequim e $Q_{comb}(\theta)$ é a quantidade de combustível liberada em função daquele. Combinando as Eqs. (1) e (2) e derivando-as em relação ao ângulo do virabrequim, obtém-se a seguinte expressão:

$$\frac{\delta Q_{\text{comb}}}{d\theta} = m_{\text{comb}} PCI \frac{dx}{d\theta} \tag{3}$$

Na Eq. (3), o termo $\delta Q_{comb}/d\theta$ representa a taxa de liberação de calor pelo combustível em função do ângulo do virabrequim, que é a variável de interesse deste trabalho.

Entretanto, para a utilização da Eq. (3), é necessário conhecer alguma função que represente a fração mássica de combustível queimado. O procedimento mais usual é usar correlações empíricas ou semi-empíricas. Existem diversas delas disponíveis na literatura (HEYWOOD, 1988), sendo a função de Wiebe, proposta originalmente no trabalho de WIEBE (1956), a mais utilizada. Esta função foi obtida pela simplificação das reações químicas que ocorrem na combustão (GHOJEL, 2010). Desde sua elaboração, foram propostas inúmeras variações para ela, cada uma tendo algum grau de sucesso em diferentes condições de operações e tipos de motores.

A maior parte das diferentes versões da função de Wiebe podem ser encontradas no trabalho de GHOJEL (2010). Destas a mais aplicada é a originalmente proposta por WIEBE (1956) que é também a mais simples:

$$x(\theta) = 1 - \exp\left[-a\left(\frac{\theta - \theta_{\text{SOC}}}{\Delta\theta}\right)^{m+1}\right] \tag{4}$$

onde θ_{SOC} é o ângulo de ignição, isto é, o ângulo de início da combustão, $\Delta\theta$ é a duração da combustão e a e m são parâmetros ajustáveis. Em motores diesel, para representar melhor as duas principais fases da combustão, a pré-misturada e a difusiva, muitos trabalhos utilizam a função de Wiebe dupla (GHOJEL, 2010), como aquela utilizada por YASAR *et al.* (2008):

$$x(\theta) = (1 - \alpha_d)\exp\left\{-a_p\left[\frac{\theta - \theta_{\text{SOC}}}{(1 - k_d)\Delta\theta}\right]^{m_p+1}\right\} + \alpha_d \exp\left[-a_d\left(\frac{\theta - \theta_{\text{SOC}}}{k_d\Delta\theta}\right)^{m_d+1}\right] \tag{5}$$

onde α_d é a fração mássica do combustível que é queimado na fase difusiva e k_d é a fração da duração da combustão correspondente à fase difusiva. Os subscritos d e p se referem, respectivamente, às fases difusiva e pré-misturada. Quando a função de Wiebe dupla não possui acurácia suficiente, utiliza-se a função de Wiebe múltipla (GHOJEL, 2010), como a função tripla aplicada por CANOVA *et al.* (2005):

$$x(\theta) = \alpha_1 x_1(\theta) + \alpha_2 x_2(\theta) + \alpha_3 x_3(\theta) \tag{6}$$

onde:

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 = 1 \tag{7}$$

$$x_i(\theta) = 1 - \exp\left[-a_i \left(\frac{\theta - \theta_{\mathrm{SOC,i}}}{\Delta\theta_i}\right)^{m_i+1}\right], \qquad i = 1, 2, 3 \tag{8}$$

Na Eq. (42), α_i é a fração mássica de combustível queimado e o índice i representa a i-ésima fase da combustão.

Apesar das inúmeras opções de funções de Wiebe disponíveis na literatura, muitas inclusive sendo capazes de representar diversas fases do processo de combustão, todas possuem quatro principais problemas, que serão discutidos a seguir.

O primeiro deles diz respeito à presença de diversas constantes de ajuste em sua expressão. Cada trabalho na literatura possui suas próprias recomendações de valores para tais constantes (HEYWOOD, 1988). Ao utilizar os mesmos valores das constantes para condições operacionais, combustíveis ou tipos de motores diferentes daqueles para os quais os valores foram validados, resultados que divergem bastante dos dados experimentais podem ser obtidos. Este fato elimina a capacidade preditiva da função de Wiebe.

Como modo de superar esse problema, a função de Wiebe é predominantemente usada como relação de fechamento de modelos de combustão juntamente com dados experimentais disponíveis, normalmente a pressão na câmara de combustão (KUMAR *et al.*, 2013). Neste tipo de utilização, lida-se com um problema inverso, pois os resultados do modelo de combustão, isto é, a pressão, já estão disponíveis e o parâmetro de interesse, a taxa de liberação de calor pelo combustível, é uma entrada do modelo. Note que, para este problema inverso, o problema direto relativo é a resolução do modelo de combustão

para o cálculo da pressão. Na solução do problema inverso, deseja-se encontrar os valores das constantes ajustáveis presentes na função de Wiebe que forneçam, através do modelo de combustão, a mesma pressão obtida experimentalmente. Esta tarefa pode ser cumprida por tentativa e erro caso a função de Wiebe simples seja utilizada. Entretanto, caso um ajuste mais preciso seja necessário ou a função de Wiebe dupla ou múltipla esteja em questão, um algoritmo de otimização deve ser usado (COLAÇO *et al.*, 2010). Porém, quando a forma da versão da função de Wiebe usada é extremamente complexa ou não-linear, podem ocorrer problemas na convergência do algoritmo, levando à necessidade de uso de outros que podem ser excessivamente sofisticados. Este consiste no segundo problema do uso da função de Wiebe.

O terceiro problema é o fato de que, mesmo com ótimas estimativas inversas para suas constantes de ajuste, a taxa de calor liberada pelo combustível ainda estará limitada pela forma da função de Wiebe usada. Isso significa que, muitas vezes, a forma escolhida para a função pode não ser aquela que dê a melhor unicidade entre os dados experimentais de pressão e os simulados pelo modelo de combustão, independentemente da eficiência e precisão do algoritmo de otimização usado. Este problema pode ser mais grave em motores diesel, devido à sua combustão possuir várias fases.

O quarto e último problema do uso da equação de Wiebe é a necessidade de informações acerca do processo de combustão: a duração e o ângulo do virabrequim de início do processo, caso a função de Wiebe simples seja usada, ou a duração e o ângulo de início de cada fase da combustão, caso uma função de Wiebe dupla ou múltipla seja usada.

À vista destes quatro problemas, metodologias para a estimativa da taxa de liberação de calor que não utilizem correlações de natureza empírica (não só a função de Wiebe) nem necessitem de informações do processo da combustão se mostram um bom tópico a ser explorado. Conforme já mencionado, esse é o principal objetivo deste trabalho: aplicar uma dessas metodologias para estimar a fração mássica de combustível queimado, o que, lembrando da Eq. (3), é equivalente a estimar a taxa de liberação de calor. A metodologia deste trabalho será similar àquela usada por HAMILTON *et al.* (2014) usada para estimar o coeficiente de transferência de calor entre a câmara de combustão e as paredes do cilindro em motor Otto e por ESTUMANO *et al.* (2014a) para estimar a taxa de liberação de calor de um motor Otto. Para a utilização da metodologia, primeiro será necessário o desenvolvimento de um modelo de combustão, que é apresentado no tópico a seguir.

3.2. Modelo de Combustão

Neste trabalho, o modelo de combustão usado é termodinâmico zero-dimensional (HEYWOOD, 1988). Para a construção do modelo, a câmara de combustão é considerada um sistema fechado, ou seja, aquele irá abranger apenas o período de tempo entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de exaustão. Ainda, a transferência de massa através das folgas entre o pistão e a parede do cilindro será desconsiderada. Assume-se que o fluido contido na câmara de combustão consiste em uma mistura ar-combustível uniformemente distribuída por toda aquela, o que, na verdade, não corresponde ao caso real, já que a parte superior da câmara de combustão será mais rica em combustível devido a sua proximidade com o sistema de injeção e a parte inferior mais pobre. É valido enfatizar que, como é usualmente realizado na construção de modelos de combustão deste tipo, a propagação da frente de chama é desconsiderada.

O modelo a ser deduzido é governado por uma equação diferencial ordinária da qual podemos calcular a pressão na câmara de combustão. Para a obtenção da equação, aplica-se a forma diferencial da Primeira Lei da Termodinâmica para sistemas fechados no volume de controle correspondente à câmara de combustão:

$$dU = \delta Q - \delta W \tag{9}$$

onde U é a energia interna total da mistura, Q a energia total na forma de calor que é recebido pela mistura e W a energia total em forma de trabalho exercido pela mistura. Esta última, pode ser escrita da seguinte forma:

$$\delta W = PdV \tag{10}$$

na qual, P é a pressão na câmara de combustão e V o volume desta. Vale ressaltar que ambos estes parâmetros variam com o tempo, isto é, com o ângulo de virabrequim, θ.

A energia total em forma de calor recebida pelo fluido pode ser dividida em duas parcelas: o calor liberado pelo queima do combustível, δQ_{comb}, e o calor transferido através das paredes do cilindro por convecção, δQ_p. Este irá retirar energia do sistema enquanto aquele irá aumentá-la, de modo que:

$$\delta Q = \delta Q_{\text{comb}} - \delta Q_{\text{p}} \tag{11}$$

Assumindo que a mistura da câmara de combustão comporta-se como um gás termicamente perfeito, em que os calores específicos são unicamente função de sua temperatura, T, a energia interna total, pode ser escrita da seguinte forma:

$$dU = m_{\text{tot}} c_V dT \tag{12}$$

onde m_{tot} é a massa total da mistura e c_V é o calor específico a volume constante. Considerando agora a equação de estado para os gases ideais para a mistura da câmara de combustão:

$$PV = m_{\text{tot}} RT \tag{13}$$

em que R é a constante dos gases ideais específica do gás que é, no caso deste trabalho, a mistura ar-combustível. O valor de R será assumido para a mistura como igual ao do ar: $R \approx 287\, J/kg\,.K$.

Escrevendo a Eq. (13) na forma diferencial, tem-se que:

$$VdP + PdV = m_{\text{tot}} RdT \tag{14}$$

Aplicando-se a Eq. (14) na Eq. (12), a seguinte equação é obtida:

$$dU = \frac{c_V}{R}(VdP + PdV) \tag{15}$$

Agora, aplica-se as Eqs. (10), (11) e (15) na Eq. (9), o que fornece:

$$\frac{c_V}{R}(VdP + PdV) = \delta Q_{\text{comb}} - \delta Q_p - PdV \tag{16}$$

Como a hipótese de gás ideal para a mistura está sendo considerada, as seguintes equações são válidas:

$$c_P - c_V = R \tag{17}$$

$$\frac{c_P}{c_V} = \gamma \tag{18}$$

onde c_P é o calor específico a pressão constante e γ é a razão dos calores específicos. Combinando as Eqs. (17) e (18), a seguinte expressão é obtida:

$$\frac{c_V}{R} = \frac{1}{1-\gamma} \tag{19}$$

Usando a Eq. (19) na Eq. (16), a Eq. (20) é obtida:

$$\frac{1}{1-\gamma}(VdP + PdV) = \delta Q_{\text{comb}} - \delta Q_p - PdV \tag{20}$$

Divide-se então a Eq. (20) pelo infinitésimo do ângulo do virabrequim ($d\theta$), obtendo assim:

$$\frac{1}{1-\gamma}\left(V\frac{dP}{d\theta} + P\frac{dV}{d\theta}\right) = \frac{\delta Q_{\text{comb}}}{d\theta} - \frac{\delta Q_p}{d\theta} - P\frac{dV}{d\theta} \tag{21}$$

Por fim, isola-se o termo $dP/d\theta$ da Eq. (21) e obtém-se a equação diferencial ordinária que descreve o modelo de combustão:

$$\frac{dP}{d\theta} = \frac{\gamma - 1}{V}\left(\frac{\delta Q_{\text{comb}}}{d\theta} - \frac{\delta Q_p}{d\theta}\right) - \frac{P}{V}\gamma\frac{dV}{d\theta} \tag{22}$$

Com a solução da Eq. (22) por meio de algum método numérico como o Runge-Kutta de 4ª ordem (PRESS *et al.*, 1992), a pressão na câmara de combustão, $P(\theta)$, entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de exaustão é obtida. Com isso, é possível também obter a temperatura na câmara de combustão, $T(\theta)$, através da Eq. (13), a qual fornece, isolando a temperatura:

$$T(\theta) = \frac{P(\theta)V(\theta)}{m_{\text{tot}}R} \tag{23}$$

Entretanto, *à priori* não são conhecidas todas as variáveis necessárias para a solução da equação diferencial ordinária da pressão e da Eq. (23), como a massa total da mistura, o volume da câmara de combustão em função do ângulo de virabrequim, a razão de calores específicos, o termo relacionado ao calor transferido através da parede do cilindro e a taxa de liberação de calor pelo combustível. É válido lembrar-se que, neste trabalho, esta última será estimada por uma metodologia que não utiliza correlações empíricas nem informações da combustão. Portanto, nenhum tipo de correlação ou submodelo para ela será utilizado como parte deste modelo de combustão. Entretanto, as outras variáveis mencionadas precisam ser calculadas conforme os tópicos a seguir descrevem.

Após a completa descrição do modelo de combustão, como parte da metodologia, será formulado um problema inverso para encontrar a taxa de liberação de calor pelo combustível, em que o problema direto relativo é resolução do modelo para o cálculo da pressão $P(\theta)$. Ao contrário da abordagem mencionada em um tópico anterior, em que o problema inverso visa estimar as constantes de ajuste da equação de Wiebe, neste trabalho, ele será formulado via inversão estatística, isto é, uma abordagem Bayesiana, que será descrita posteriormente, após o fim do detalhamento do modelo de combustão feito nos tópicos a seguir.

3.2.1. Massa da Mistura

A massa total da mistura m_{tot}, pode ser expressa em função de outras variáveis que podem ser obtidas experimentalmente ou através das informações fornecidas pelo fabricante do motor em questão. Para motores diesel, assumindo que todo o combustível é injetado de uma só vez na câmara de combustão no momento em que a agulha do bico injetor levanta, m_{tot} pode ser calculado por:

$$m_{\text{tot}} = \begin{cases} m_{\text{ar}}\,, & \theta < \theta_{\text{SOI}} \\ m_{\text{ar}} + m_{\text{comb}}\,, & \theta \geq \theta_{\text{SOI}} \end{cases} \tag{24}$$

onde m_{ar} é a massa do ar e θ_{SOI} é o ângulo de início da injeção. Ambas as massas do combustível e do ar podem ser calculadas em função de suas respectivas vazões mássicas totais:

$$m_{\mathrm{ar}} = \frac{\dot{m}_{\mathrm{ar}} n_R}{N n_{\mathrm{cil}}} \tag{25}$$

$$m_{\mathrm{comb}} = \frac{\dot{m}_{\mathrm{comb}} n_R}{N n_{\mathrm{cil}}} \tag{26}$$

Nas Eqs. (25) e (26), $\dot{m}_{\mathrm{ar}}$ e $\dot{m}_{\mathrm{comb}}$ são as vazões mássicas totais, isto é, para todos os cilindros do motor, de ar e de combustível, respectivamente, N é a frequência de rotação do motor e n_{cil} é o seu número de cilindros. O parâmetro n_R representa quantas rotações completas do virabrequim existem por ciclo (admissão-compressão-expansão-exaustão) e equivale a:

$$n_R = \begin{cases} 1\text{ , para motores de 2 tempos} \\ 2\text{ , para motores de 4 tempos} \end{cases} \tag{27}$$

3.2.2. Razão dos Calores Específicos

A razão dos calores específicos pode ser expressa pela seguinte equação, obtida através da combinação das Eqs. (17) e (18):

$$\gamma = \frac{c_P}{c_P - R} \tag{28}$$

Pela equação acima, basta encontrar o valor de c_P que o valor da razão de calores específicos é determinado. Lembrando que, para gases termicamente perfeitos, c_P varia apenas com a temperatura, vê-se que é necessário uma correlação empírica que expresse corretamente essa dependência do c_P. No trabalho de ABU-NADA *et al.* (2006), que simularam um motor Otto usando também um modelo termodinâmico zero-dimensional de combustão, foi assumido que o c_P da mistura ar-combustível pode ser aproximado como o mesmo do ar teórico. Com isso, a seguinte expressão polinomial foi usada:

$$\frac{c_P(T)}{R} = \mu_0 + \mu_1 T + \mu_2 T^2 + \mu_3 T^3 + \mu_4 T^4 \tag{29}$$

onde os coeficientes μ_0, μ_1, μ_2, μ_3 e μ_4 possuem os valores indicados na Tabela 1.

Tabela 1 – Coeficientes da expressão polinomial para o c_P (ABU-NADA *et al.*, 2006).

$T\ (K)$	$\mu_0(-)$	$\mu_1 \,.\, 10^4 (K^{-1})$	$\mu_2 \,.\, 10^6 (K^{-2})$	$\mu_3 \,.\, 10^{12} (K^{-3})$	$\mu_4 \,.\, 10^{15} (K^{-4})$
$200 - 1000$	3.56839	-6.788729	1.5537	-3.29937	-466.395
$1000 - 6000$	3.08793	12.4597	-0.42372	67.4775	-3.97077

3.2.3. Equacionamento da Geometria

Para a aplicação do modelo termodinâmico deste trabalho, dois parâmetros geométricos de extrema importância, a área total e o volume da câmara de combustão, deverão ser expressos em função do ângulo do virabrequim e também de outras variáveis geométricas cujas cotas podem ser obtidas através do fabricante do motor. Com isso, considera-se a geometria do aparato cilindro-pistão-biela-virabrequim ilustrada na Figura 3, onde B é o diâmetro do cilindro, C é o raio do virabrequim, L é o comprimento da biela, $s(\theta)$ é o curso instantâneo do pistão e PMI e PMS são, respectivamente, o ponto morto inferior e superior do pistão:

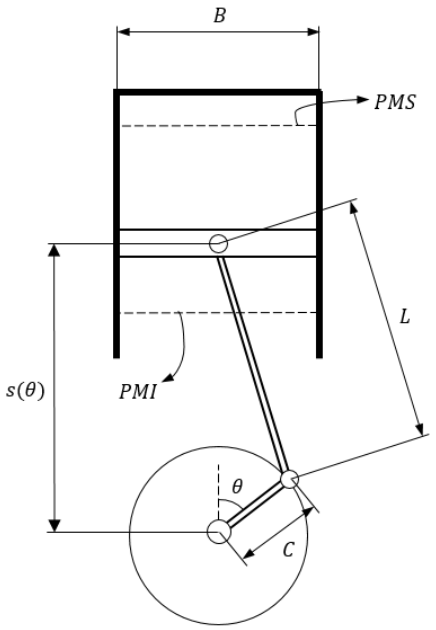

Figura 3 - Geometria do conjunto cilindro-pistão-biela-virabrequim.

Usando a Lei dos Cossenos no triângulo formado pelo curso instantâneo do pistão, pelo raio do virabrequim e pela biela, obtém-se a seguinte expressão isolando o termo $s(\theta)$:

$$s(\theta) = C\cos\theta + \sqrt{L^2 - C^2\text{sen}^2\theta} \tag{30}$$

O volume da câmara de combustão, $V(\theta)$, pode ser expresso como:

$$V(\theta) = \frac{\pi B^2}{4}[L + C - s(\theta)] + V_m \tag{31}$$

onde V_m é o volume morto do cilindro, ou seja, aquele entre o PMS e o cabeçote do cilindro. Para calculá-lo, é necessário lembrar da definição de razão de compressão, r_c:

$$r_c = \frac{V_m + V_d}{V_m} \tag{32}$$

onde V_d é o volume deslocado, definido pela seguinte expressão:

$$V_d = \frac{\pi B^2}{4}S \tag{33}$$

na qual S é o curso total do pistão medido pela distância entre o PMI e o PMS, que pode ser, por sua vez calculado a partir do raio do virabrequim:

$$S = s(0) - s(180°) = 2C \tag{34}$$

Usando as Eqs. (32)-(34), chega-se a seguinte expressão para o volume morto:

$$V_m = \frac{\pi B^2}{4}\left(\frac{2C}{r_c - 1}\right) \tag{35}$$

Portanto, aplicando as Eqs. (30) e (35) na Eq. (31), é possível calcular o volume da câmara de combustão:

$$V(\theta) = \frac{\pi B}{4}\left[L + C - C\cos\theta - \sqrt{L^2 - C^2\text{sen}^2\theta} + \frac{2C}{r_c - 1}\right] \tag{36}$$

A área total da câmara de combustão, $A(\theta)$, é a combinação da área lateral do cilindro, $A_{\text{lat}}(\theta)$, da área do cabeçote do cilindro, A_{sup}, e da área da face superior do pistão, $A_{\text{pistão}}$, fornecendo:

$$A(\theta) = A_{\text{lat}}(\theta) + A_{\text{pistão}} + A_{\text{sup}} \tag{37}$$

É válido assumir que a face superior do pistão é plana e aproximadamente igual à área do cabeçote do cilindro. Com isso, é possível escrever que:

$$A_{\text{pistão}} \approx A_{\text{sup}} = \frac{\pi B^2}{4} \tag{38}$$

A área lateral do cilindro pode ser expressa como:

$$A_{\text{lat}}(\theta) = \pi B[L + C - s(\theta)] + A_m \tag{39}$$

onde A_m é a área lateral do volume morto do cilindro. Usando novamente as Eqs. (33) e (34), a seguinte equação é obtida:

$$A_m = \pi B\left(\frac{2C}{r_c - 1}\right) \tag{40}$$

Usando as Eqs. (30), (38), (39) e (40), a Eq. (37) se torna:

$$A_{\text{lat}}(\theta) = \pi B\left[\frac{B}{2} + L + C - C\cos\theta - \sqrt{L^2 - C^2\text{sen}^2\theta} + \frac{2C}{r_c - 1}\right] \tag{41}$$

Neste tópico, foram obtidas expressões para o volume da câmara de combustão que será utilizado diretamente na equação diferencial ordinária do modelo, Eq. (22), e também para a área da câmara de combustão, a qual será útil no tópico a seguir.

3.2.4. Transferência de Calor Através das Paredes do Cilindro

A modelagem da perda de energia via transferência de calor por convecção através das paredes do cilindro, $\delta Q_p/d\theta$, é extremamente importante devido aos diferentes efeitos que ela pode causar no motor (BORMAN e NISHIWAKI, 1987). A Lei de Resfriamento de Newton será utilizada para representar tais efeitos:

$$\frac{\delta Q_p}{d\theta} = \frac{A(\theta)h(\theta)\left[T(\theta) - T_p\right]}{2\pi N} \tag{42}$$

onde $h(\theta)$ é o coeficiente de transferência de calor por convecção e T_p é a temperatura na parede do cilindro. O trabalho de RAKOPOULOS *et al.* (2004) investigou as variações da temperatura da parede do cilindro em motores diesel durante ciclos completos e para várias condições de operação. Eles concluíram que estas variações são desprezíveis quando comparadas às variações da temperatura da mistura contida na câmara de combustão. Portanto, neste trabalho será assumido que a temperatura na parede é constante.

Existem inúmeras correlações empíricas e semi-empíricas que expressam o valor do coeficiente de transferência de calor, $h(\theta)$, ao longo do ciclo completo (BORMAN e NISHIWAKI, 1987, HEYWOOD, 1988). Ao longo deste trabalho, será utilizada a correlação de Woschni (WOSCHNI, 1967) devido ao seu amplo histórico de uso em modelagens termodinâmicas zero-dimensionais:

$$h(\theta) = 0.013\{B[m]\}^{-0.2}\{P(\theta)[Pa]\}^{0.8}\{T(\theta)[K]\}^{-0.53}\{v(\theta)[m/s]\}^{0.8} \tag{43}$$

na qual $v(\theta)$ é a velocidade média, em m/s, que a mistura adquire na câmara de combustão. A velocidade $v(\theta)$ pode ser expressa pela seguinte correlação:

$$v(\theta) = C_1\bar{S}_p + C_2\frac{V_d T_{\text{adm}}}{P_{\text{adm}}V_{\text{adm}}}\left[P(\theta) - P_M(\theta)\right] \tag{44}$$

onde $P_M(\theta)$ é a pressão na câmara de combustão devido apenas ao ciclo motor, isto é, quando não há combustão. As variáveis P_{adm}, T_{adm} e V_{adm} são, respectivamente, a

pressão, a temperatura e o volume no momento do fechamento da válvula de admissão. Os coeficientes C_1 e C_2 são empíricos e variam conforme a Tabela 2 indica:

Tabela 2 - Coeficientes da velocidade da mistura ar-combustível da equação de WOSCHNI (1967).

Intervalo de tempo	$C_1(-)$	$C_2(m.s^{-1}.K^{-1})$
Admissão e Exaustão	6.18	0
Compressão	2.28	0
Combustão e Expansão	2.28	0.00324

Para o cálculo da pressão devido ao ciclo motor, é necessário resolver este mesmo modelo aqui descrito, porém para $\delta Q_{\text{comb}}/d\theta = 0$. Com isso, a Eq. (22) pode ser reescrita como:

$$\frac{dP_M}{d\theta} = -\frac{\gamma - 1}{V}\frac{\delta Q_p}{d\theta} - \frac{P_M}{V}\gamma\frac{dV}{d\theta} \tag{45}$$

na qual o termo $\delta Q_p/d\theta$ também é modelado pelas Eqs. (42)-(44), porém fixando o valor de um dos coeficientes da Eq. (44): $C_2 = 0$.

Por fim, a variável $\bar{S}_p$ representa a velocidade média do pistão. Sabendo que, a cada rotação do virabrequim, o pistão percorre duas vezes o curso total, é possível expressar $\bar{S}_p$ pela seguinte equação:

$$\bar{S}_p = 2SN \tag{46}$$

Entretanto, enfatiza-se que a expressão de WOSCHNI (1967) para o coeficiente de transferência de calor é empírica e, portanto, a sua capacidade de descrevê-lo corretamente para condições operacionais fora daquelas nas quais ela foi elaborada pode não ser satisfatória. À vista disso, HAMILTON *et al.* (2014) estimaram o coeficiente de transferência de calor usando uma metodologia similar àquela que será usada neste trabalho.

3.3. Formulação da Abordagem Bayesiana de Problemas Inversos

Conforme anteriormente mencionado, neste trabalho, a resolução do problema inverso será feita por inversão estatística (KAIPIO e SOMERSALO, 2004), ou seja, por uma abordagem Bayesiana. Em problemas físicos, existem variáveis que podem ser observadas diretamente e outras que não. Em problemas inversos, o interesse está nas variáveis que não podem ser observadas e dependem mutuamente das variáveis observáveis através de modelos (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). O objetivo da inversão estatística é extrair informações das variáveis não observáveis e avaliar a incerteza destas com base em todo o conhecimento disponível do processo de medição e com base em informações e modelos das incógnitas disponíveis antes da obtenção das medições (KAIPIO e SOMERSALO, 2004).

A inversão estatística é baseada nos seguintes princípios (KAIPIO e SOMERSALO, 2004):

- Todas as variáveis incluídas no modelo são modeladas como variáveis randômicas;
- A randomicidade descreve o nível de informação sobre suas realizações;
- Os níveis de informação são representados por densidades de probabilidade, isto é, PDF's (*Probability Density Function*);
- A solução do problema inverso é a densidade de probabilidade posterior.

Dos princípios acima, o mais importante é o quarto, pois ele é a principal diferença entre a inversão estatística e os métodos determinísticos de resolução de problemas inversos. Estes produzem estimativas únicas das incógnitas, enquanto a inversão estatística calcula a probabilidade que diversas estimativas têm de ocorrer, isto é, um intervalo de confiança (KAIPIO e SOMERSALO, 2004).

Nos problemas inversos, as variáveis observáveis são designadas como medições e estão contidas no vetor $\mathbf{z}$. Essas medições consistem em dados experimentais, dos quais, muitas vezes, medições sintéticas podem ser geradas para a verificação da eficiência de métodos de solução dos problemas inversos (ORLANDE *et al.*, 2008, SILVA *et al.*, 2010, SILVA *et al.*, 2011, HAMILTON *et al.*, 2014, ESTUMANO *et al.*, 2014a), As variáveis de interesse estão contidas no vetor $\mathbf{x}$ e, na inversão estatística, assume-se que um conjunto de informações a respeito dessas variáveis está disponível, representado por $\pi_{\mathrm{pr}}(\mathbf{x})$, onde $\pi(.)$ representa uma densidade de probabilidade. $\pi_{\mathrm{pr}}(\mathbf{x})$ é denominada densidade anterior (*prior density*).

Para a solução do problema inverso, deve-se encontrar $\pi(\mathbf{x}|\boldsymbol{z})$, isto é, a probabilidade condicional, ou densidade de probabilidade, das incógnitas $\mathbf{x}$ dadas as medições $\mathbf{z}$. $\pi(\mathbf{x}|\boldsymbol{z})$ também pode ser designada como densidade posterior, $\pi_{\text{post}}(\mathbf{x})$, como forma de ressaltar sua diferença com relação a $\pi_{\text{pr}}(\mathbf{x})$. Para encontrar $\pi(\mathbf{x}|\boldsymbol{z})$, o Teorema de Bayes é utilizado (ARULAMPALAM *et al.*, 2002, KAIPIO e SOMERSALO, 2004):

$$\pi_{\text{post}}(\mathbf{x}) = \pi(\mathbf{x}|\mathbf{z}) = \frac{\pi_{\text{pr}}(\mathbf{x})\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x})}{\pi(\mathbf{z})} \tag{47}$$

onde, $\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ é a função de verossimilhança e $\pi(\mathbf{z})$ é a densidade de probabilidade das medições. Esta funciona como constante de normalização do Teorema de Bayes e é de difícil determinação (KAIPIO e SOMERSALO, 2004).

A função de verossimilhança $\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x})$ pode ser interpretada como a probabilidade de diferentes medições serem obtidas para os mesmos valores das incógnitas (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Encontrar esta função é bastante importante, porém pode também ser uma tarefa desafiadora, pois existem diversas formas para ela que variam conforme o tipo de problema enfrentado (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Se for assumido que os erros contidos nas medições $\mathbf{z}$ são variáveis randômicas de distribuição Gaussiana, de média zero, possuem uma matriz de covariância $\mathbf{W}_{\text{z}}$ conhecida, são aditivos e independentes das variáveis de interesse $\mathbf{x}$, a função de verossimilhança pode ser expressa por (KAIPIO e SOMERSALO, 2004, COLAÇO *et al.*, 2012, HAMILTON *et al.*, 2014, ESTUMANO *et al.*, 2014a):

$$\pi(\mathbf{z}|\mathbf{x}) = (2\pi)^{-n_z/2}|\mathbf{W}_{\text{z}}|^{-1/2}\exp\left\{-\frac{1}{2}[\mathbf{z}-\mathbf{T}(\mathbf{x})]^T\mathbf{W}_{\text{z}}{}^{-1}[\mathbf{z}-\mathbf{T}(\mathbf{x})]\right\} \tag{48}$$

onde $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ é a resolução do problema direto para um determinado vetor $\mathbf{x}$, n_z é a dimensão do vetor de medições e $|\mathbf{W}_{\text{z}}|$ é o determinante da matriz de covariância. É notável que, mesmo quando a distribuição dos erros das medições $\mathbf{z}$ não é Gaussiana, assumir que eles têm essa distribuição é uma boa suposição quando há um grande número de medições mutuamente independentes, devido ao Teorema Central do Limite (KAIPIO e SOMERSALO, 2004).

Agora, a teoria da inversão estatística, isto é, a abordagem Bayesiana, necessária para resolvermos problemas inversos foi apresentada e está disponível. No trabalho recente de ESTUMANO *et al.* (2014b), a teoria de inversão estatística foi usada na estimativa das constantes empíricas da função de Wiebe com o método de MCMC através do algoritmo Metropolis-Hasting (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Entretanto, essa forma de solução não será usada neste trabalho.

O problema inverso que será tratado possui uma característica especial: suas variáveis são dinâmicas, isto é, variam no tempo. Neste caso, o problema inverso é dito não-estacionário e necessita de uma teoria a mais para ser devidamente formulado e tratado, a qual será apresentada a seguir.

3.4. Formulação do Problema Inverso Não-Estacionário

Em problemas inversos não-estacionários, também conhecidos como problemas de estimativa de estados (KAIPIO e SOMERSALO, 2004), os dados experimentais disponíveis são usados em conjunto com informações conhecidas *à priori* da física do fenômeno em questão e dos equipamentos de medição, de modo a obter estimativas de variáveis dinâmicas. Para a definição de um problema inverso não-estacionário dois modelos são considerados: o modelo de evolução e o modelo de observação (ARULAMPALAM, *et al.*, 2002, KAIPIO e SOMERSALO, 2004).

A forma geral do modelo de evolução é representada por:

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{v}_{k-1}) \tag{49}$$

onde o índice k se refere ao k-ésimo instante de tempo do problema dinâmico em questão. O vetor $\mathbf{x} \in \Re^{n_x}$ que contém as variáveis de interesse do problema inverso é chamado, na teoria de problemas inversos não-estacionários, de vetor de estado e contém n_x elementos. Por sua vez, o vetor $\mathbf{v} \in \Re^{n_x}$ é denominado vetor de ruído de estado e também possui n_x elementos. A função $\mathbf{f}$ representa o modelo de evolução que faz o vetor de estado avançar no tempo e é usualmente não-linear.

O já mencionado vetor de medições $\mathbf{z}_k \in \Re^{n_z}$ é relacionado com o vetor de estado $\mathbf{x}_k$ através do modelo de observação, cuja forma geral é:

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{h}_k(\mathbf{x}_k, \mathbf{n}_k) \tag{50}$$

onde a função **h** representa o modelo de observação e também costuma ser não-linear. O vetor $\mathbf{n} \in \Re^{n_z}$, que possui n_z elementos, representa o ruído dos dados experimentais.

O principal objetivo de um problema inverso não-estacionário é estimar o vetor de estado $\mathbf{x}_k$ com base no modelo de evolução, Eq. (49), e no modelo de observação, Eq. (50), isto é, as medições $\mathbf{z}_k$ (ARULAMPALAM *et al.*, 2002, KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Na formulação de ambos modelos, as seguintes hipóteses são feitas (KAIPIO e SOMERSALO, 2004):

- Para todo instante de tempo k, o vetor de estado $\mathbf{x}_k$ é um processo de Markov, ou seja:

$$\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1}) = \pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{x}_{k-1}) \tag{51}$$

- Para todo instante de tempo k, o vetor de medição $\mathbf{z}_k$ é um processo de Markov em relação à história de $\mathbf{x}_k$:

$$\pi(\mathbf{z}_k|\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k) = \pi(\mathbf{z}_k|\mathbf{x}_k) \tag{52}$$

- O vetor de estado para todo instante k depende das observações passadas através apenas de sua própria história:

$$\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{x}_{k-1}, \mathbf{z}_{1:k-1}) = \pi(\mathbf{x}_k|\, \mathbf{x}_{k-1}) \tag{53}$$

- Para $i \neq j$, os vetores de ruído $\mathbf{v}_i$ e $\mathbf{v}_j$, assim como $\mathbf{n}_i$ e $\mathbf{n}_j$ são mutualmente independentes e independentes do vetor de estado inicial $\mathbf{x}_0$.
- Para todo i e j, os vetores $\mathbf{v}_i$ e $\mathbf{v}_j$ são mutualmente independentes.

Existem diferentes tipos de problemas inversos não-estacionários que podem ser formulados com base nos modelos de evolução e de observação (KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Destes, se destacam os problemas de predição, onde deseja-se determinar $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k-1})$, os problemas de filtragem, onde deseja-se encontrar $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k})$, os problemas de defasagem fixa (*fixed-lag problems*), nos quais é calculado $\pi\left(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k+p}\right)$, sendo p a defasagem fixa, e os problemas de suavização de domínio

completo (*whole-domain smoothing problems*), em que determina-se $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:K})$, onde K é o índice do instante de tempo final do problema. Neste trabalho, o problema físico será formulado como um problema de filtragem.

Na abordagem Bayesiana via inversão estatística, o problema inverso não-estacionário de filtragem tem o objetivo de calcular recursivamente um determinado grau de confiança no estado $\mathbf{x}_k$, para diferentes valores do instante de tempo k e considerando as medições $\mathbf{z}_{1:K}$ dadas até o mesmo (ARULAMPALAM *et al.*, 2002). Então, será necessária a construção da densidade de probabilidade de $\mathbf{x}_k$ dado $\mathbf{z}_{1:K}$. Assumindo que a densidade de probabilidade do estado inicial $\pi(\mathbf{x}_0|\mathbf{z}_0) \equiv \pi(\mathbf{x}_0)$ é conhecida *à priori*, onde $\mathbf{z}_0$ é o vetor de medições no estado inicial o qual é nulo, a densidade de probabilidade $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k})$ pode ser obtida recursivamente através de dois passos: predição e atualização (KAIPIO e SOMERSALO, 2004), conforme esquematizado pela Figura 4.

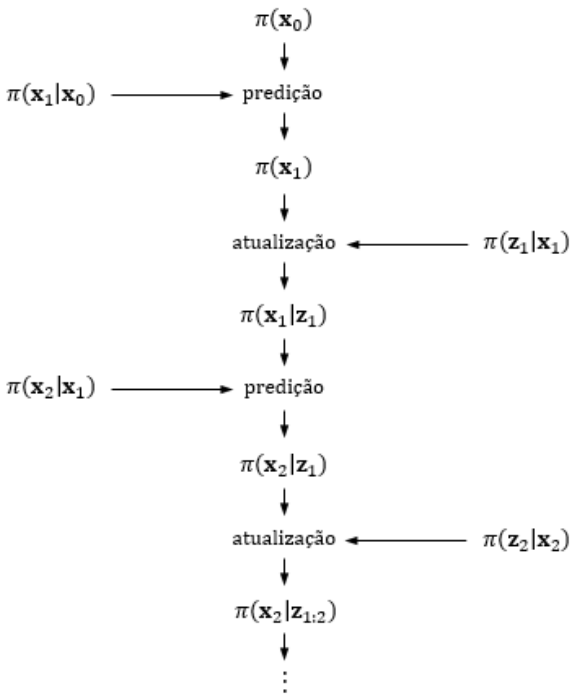

Figura 4 - Predição e atualização (KAIPIO e SOMERSALO, 2004).

Problemas inversos não-estacionários, solucionados recursivamente pela aplicação dos passos de predição e atualização, podem ser resolvidos por diversos algoritmos, sendo o mais usado deles o filtro de Kalman (KALMAN, 1960). Entretanto, o filtro de Kalman supõe que os modelos de evolução e de observação são ambos lineares

e que o ruído nos dois modelos, $\mathbf{v}_k$ e $\mathbf{n}_k$, possui uma distribuição Gaussiana (ARULAMPALAM *et al.*, 2002).

Como será visto posteriormente, embora a hipótese de distribuição Gaussiana do ruído possa ser considerada quando há um grande número de medições, os modelos não serão lineares neste trabalho, o que inviabiliza o uso do filtro de Kalman. Nesta situação, outros algoritmos podem ser utilizados, com destaque para os filtros de partículas Bayesianos (ARULAMPALAM *et al.*, 2002, KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Existem diversos tipos de filtros de partículas, como o *Sequential Importance Sampling* (SIS), proposto por HAMMERSLEY e HANSCOMB (1964). Neste trabalho, será utilizado o filtro *Sampling Importance Resampling* (SIR), descrito no próximo tópico, que é uma versão modificada do filtro SIS que possui um passo a mais em seu algoritmo, conforme proposto por GORDON *et al.* (1993). Na seção de revisão bibliográfica, foi visto que diversos trabalhos obtiveram um maior sucesso utilizando um outro filtro: o filtro *Auxilary Sampling Importance Resampling* (ASIR), elaborado por PITT e SHEPHARD (1999). Entretanto, o filtro SIR ainda possui vantagens como o baixo tempo computacional e sua simplicidade quando comparado ao filtro ASIR. A utilização deste para a estimativa da taxa de liberação de calor será feita em trabalhos futuros.

3.5. Filtro *Sampling Importance Resampling* (SIR)

O filtro SIR é uma técnica de Monte Carlo que realiza a implementação de um filtro recursivo Bayesiano através de simulações de Monte Carlo (ARULAMPALAM *et al.*, 2002). Um algoritmo deste tipo é também conhecido na literatura como *bootstrap filter*, algoritmo de condensação, aproximação de partículas interativas ou sobrevivência do mais apto (ARULAMPALAM *et al.*, 2002). A principal ideia do filtro SIR é representar a densidade de probabilidade do estado posterior, isto é, o termo $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k})$ do Teorema de Bayes, Eq. (47), por uma série de amostras (partículas) com pesos associados e também computar estimativas com base naquelas e em seus pesos (ARULAMPALAM *et al.*, 2002). À vista disso, é possível escrever (ARULAMPALAM *et al.*, 2002):

$$\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \delta\left(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^i\right) \tag{54}$$

onde N_s é o número total de partículas, $\delta(.)$ é a função delta de Dirac, w_k^i é o peso associado da i-ésima partícula no k-ésimo instante. À medida que $N_s \to \infty$, a aproximação da Eq. (54) tende a se tornar exata. Os pesos w_k^i podem ser calculados através da função de verossimilhança (ARULAMPALAM *et al.*, 2002):

$$w_k^i = \pi\left(\mathbf{z}_k | \mathbf{x}_k^i\right) \tag{55}$$

O filtro SIR foi proposto por GORDON *et al.* (1993) como uma versão do filtro SIS que possui meios de lidar com a degeneração de partículas. Este problema consiste no grande esforço computacional que é utilizado para atualizar partículas com peso associado w_k^i muito pequeno, isto é, com contribuição para a densidade de probabilidade aproximadamente nula (ARULAMPALAM *et al.*, 2002). Este fenômeno era algo recorrente quando o filtro SIS era usado, porém foi consideravelmente mitigado pelo filtro SIR através de um algoritmo de reamostragem ou ressampleamento (*ressampling*). A ideia deste algoritmo é eliminar as partículas com pesos associados pequenos, substituindo-as por partículas de pesos associados maiores (ARULAMPALAM *et al.*, 2002, KAIPIO e SOMERSALO, 2004). Além da reamostragem, outra forma de combater a degeneração de partículas é aumento da população destas (ARULAMPALAM *et al.*, 2002). Apesar da reamostragem reduzir os efeitos de degeneração de partículas, ele pode levar à perda de diversidade das partículas, fazendo com que sua população total tenha muitas partículas repetidas. Esse problema, conhecido como empobrecimento da amostra (*sample impoverishment*), pode ser grave em casos em que o erro do modelo de evolução $\mathbf{v}_k$ é muito pequeno (RISTIC *et al.*, 2004, HAMILTON *et al.*, 2014). Neste caso, todas as partículas podem convergir para uma mesma partícula em poucos instantes de tempo (RISTIC *et al.*, 2004, HAMILTON *et al.*, 2014).

O algoritmo convencional do filtro SIR está descrito na Tabela 3. Nela, é possível localizar os passos de predição e atualização que todo algoritmo de solução recursiva de problemas inversos não-estacionários deve possuir, conforme foi ilustrado na Figura 4. O passo de predição consiste na extração de novas partículas $\mathbf{x}_k^i$ da densidade de probabilidade anterior, o que é feito dentro do Passo 1. O passo de atualização consiste no cálculo dos pesos para estimar $\pi(\mathbf{x}_k | \mathbf{z}_{1:k})$, pela Eq. (54), o que também é feito no Passo 1.

Tabela 3 – Algoritmo do filtro SIR (ARULAMPALAM *et al*., 2002).

Passo 1 (Cálculo dos Pesos Associados)
• Para $i = 1, \ldots, N_s$:
  ○ Extraia novas partículas $\mathbf{x}_k^i$ da densidade de probabilidade anterior $\pi\left(\mathbf{x}_k \middle| \mathbf{x}_{k-1}^i\right)$
  ○ Use a função de verossimilhança para o cálculo dos pesos: $w_k^i = \pi\left(\mathbf{z}_k \middle| \mathbf{x}_{k-1}^i\right)$.

Passo 2 (Normalização dos Pesos) • Calcule o peso total das partículas: $\tau = \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i$ • Para $i = 1, \ldots, N_s$: Normalize o pesos das partículas: $w_k^i = w_k^i / \tau$

Passo 3 (Reamostragem):
• Construa a soma acumulativa de pesos (C*umulative Sum of Weights* – CSW) computando $c_i = c_{i-1} + w_k^i$ para $i = 1, \ldots, N_s$, onde $c_0 = 0$
• Defina $i = 1$
• Extraia o ponto de início u_1 da distribuição uniforme $\mathrm{U}\left[0, {N_s}^{-1}\right]$
• Para $j = 1, \ldots, N_s$:
  ○ Faça $u_j = u_1 + (j-1)/N_s$
  ○ Enquanto $u_j > c_i$: $i = i + 1$
  ○ Defina $x_k^j = x_k^i$
  ○ Defina $w_k^j = 1/N_s$

É possível visualizar mais facilmente o algoritmo do filtro SIR e os passos de predição e atualização junto com a reamostragem pela Figura 5, adaptada de RISTIC *et al.* (2004).

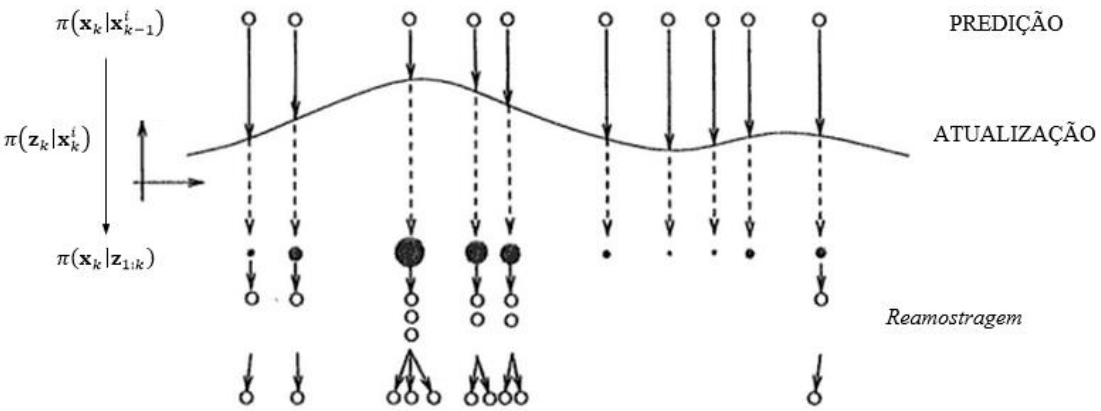

Figura 5 - Representação do filtro SIR, adaptada de RISTIC *et al.* (2004).

Até este ponto, a teoria de problemas inversos não-estacionários sob a perspectiva Bayesiana foi apresentada juntamente com um modelo de combustão e com um filtro de partículas Bayesiano usado na solução recursiva do problema. Portanto, a teoria necessária para estimar a taxa de liberação de calor pelo combustível sem o uso de expressões empíricas foi apresentada. No próximo tópico, a aplicação dessa teoria para o problema inverso em questão será detalhada e o algoritmo final usado para a solução do problema será descrito.

3.6. Algoritmo Final

Na formulação do problema inverso não-estacionário, primeiramente deve-se identificar quais variáveis estão contidas no vetor de estado $\mathbf{x}_k$ e quais estão no vetor de medições $\mathbf{z}_k$. Conforme foi dito em seções anteriores, estão disponíveis as medições de pressão na câmara de combustão de um motor marítimo diesel, obtidas em ensaios experimentais a serem descritos na próxima seção do trabalho. Portanto, o vetor de medições pode ser expresso por:

$$\mathbf{z}_k = \{P_{\mathrm{med}}(\theta_k)\} \tag{56}$$

onde $P_{\mathrm{med}}(\theta_k)$ é a pressão medida para o ângulo do virabrequim correspondente ao k-ésimo instante de tempo.

É válido lembrar que, no problema inverso deste trabalho, deseja-se estimar a taxa de liberação de calor pelo combustível usando os dados de pressão como referência. Portanto, lembrando ainda que a taxa de liberação de calor pode ser facilmente obtida com a fração mássica de combustível queimado pela Eq. (3), o vetor de estado da i-ésima partícula do filtro SIR é fornecido por:

$$\mathbf{x}_k^i = \left\{P_{\mathrm{est}}^i(\theta_k), \frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k)\right\} \tag{57}$$

onde $dx^i(\theta_k)/d\theta$ é a taxa de variação da fração mássica de combustível queimado no ângulo de virabrequim no k-ésimo instante de tempo e $P_{\mathrm{est}}^i(\theta_k)$ é a pressão estimada pelo

modelo de combustão neste mesmo instante de tempo e usando este mesmo valor de $dx^i(\theta_k)/d\theta$ como entrada.

Após a definição das variáveis presentes nos vetores de estado e de medição, é possível definir quais são os modelos de evolução **f** e de observação **h**. Este é simplesmente dado pelas medições feitas da pressão na câmara de combustão. O modelo de evolução tem como objetivo "avançar no tempo" as variáveis do vetor de estado. A evolução da pressão estimada, é feita pela aplicação do modelo de combustão através da utilização do método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem (PRESS *et al.*, 1992), o que é descrito pelas seguintes equações:

$$P_{\text{est}}^i(\theta_{k+1}) = P_{\text{est}}^i(\theta_k) + d_\theta\left(\frac{\beta_1}{6} + \frac{\beta_2}{3} + \frac{\beta_3}{3} + \frac{\beta_4}{6}\right) \tag{58}$$

onde d_θ é o passo do ângulo do virabrequim, ou seja, no tempo e os parâmetros β_1, β_2, β_3 e β_4 são calculados pelas expressões:

$$\beta_1 = f_{\text{modelo}}\left(\theta_k, \frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k)\right) \tag{59a}$$

$$\beta_2 = f_{\text{modelo}}\left(\theta_k + \frac{d_\theta}{2}, \frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k) + \frac{\beta_1}{2}\right) \tag{59b}$$

$$\beta_3 = f_{\text{modelo}}\left(\theta_k + \frac{d_\theta}{2}, \frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k) + \frac{\beta_2}{2}\right) \tag{59c}$$

$$\beta_4 = f_{\text{modelo}}\left(\theta_k + d_\theta, \frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k) + \beta_3\right) \tag{59d}$$

nas quais f_{modelo} é a função usada no modelo de combustão para o cálculo de $dP/d\theta$ expressa na Eq. (22). Os erros do modelo de evolução contidos no vetor $\mathbf{v}_k$ serão desprezados neste trabalho: $\mathbf{v}_k \approx \{0\}$.

Ao contrário da pressão na câmara de combustão, não é conhecida nenhuma função matemática que expresse o avanço no tempo da taxa de variação da fração mássica de combustível queimado $dx^i(\theta_k)/d\theta$. Neste caso, utiliza-se um modelo de *Random-Walk*, dado por (ESTUMANO *et al.*, 2014a):

$$\frac{dx^i}{d\theta}(\theta_{k+1}) = \left[1 + \sigma_h \varepsilon^i\right] \frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k) + \sigma_b \varepsilon^i \tag{60}$$

na qual σ_h é o passo do modelo de *Random-Walk*, σ_b é um parâmetro de tendência (*bias*) e ε^i é um número randômico extraído de uma distribuição uniforme de média 0 e valores entre 1 e -1. Pelo índice i em ε^i, vemos que cada partícula deve usar um número randômico diferente. O passo do modelo de *Random-Walk* e o parâmetro de tendência são puramente arbitrários, o que implica na necessidade de uma análise inicial ser feita para determinar seus valores que provêm os melhores resultados.

Quando o filtro SIR foi apresentado, foram identificados os passos de predição e atualização em seu algoritmo. O passo de predição $\pi(\mathbf{x}_{k+1}|\mathbf{x}_k)$ nada mais é do que a evolução no tempo da densidade probabilidade das variáveis do vetor de estado, o que pode ser obtido por meio do modelo de evolução. Para a obtenção de $\pi(\mathbf{x}_k|\mathbf{z}_{1:k})$ no passo de atualização, conforme já mencionado, será usada a aproximação do filtro SIR contida na Eq. (54) que evita a necessidade da avaliação matemática do Teorema de Bayes, Eq. (47). O cálculo dos pesos das partículas realizado através da função de verossimilhança, Eq. (55), o que pode ser desafiador devido ao formato complexo para essa função, visto na Eq. (48). Adotando simplificações contidas em KAIPIO e SOMERSALO (2004) para o tipo de problema enfrentado neste trabalho, a função de verossimilhança pode ser expressa alternativamente da seguinte maneira:

$$\pi\left(\mathbf{z}_k|\mathbf{x}_k^i\right) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\frac{P_{\text{est}}^i(\theta_k) - P_{\text{med}}(\theta_k)}{\sigma_{\text{med}}(\theta_k)}\right]^2\right\} \tag{61}$$

onde $\sigma_{\text{med}}(\theta_k)$ é o desvio padrão das medições, no nosso caso, das pressões na câmara de combustão, no ângulo do virabrequim referente ao k-ésimo instante de tempo.

Em cada ângulo do virabrequim, após a realização dos passos de predição e atualização do filtro SIR e após a reamostragem das partículas e a normalização de seus respectivos pesos, é possível calcular os intervalos de confiança correspondentes à taxa de variação da fração mássica de combustível queimado, isto é, à taxa de liberação de calor pelo combustível, e correspondente à pressão da câmara de combustão estimadas a partir da densidade de probabilidade do vetor de estado $\mathbf{x}_k$. Para isso, suas médias e desvios padrão serão calculados em cada ângulo do virabrequim por meio das expressões (HAMILTON *et al.*, 2012):

$$\overline{P_{\text{est}}}(\theta_k) = \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i P_{\text{est}}^i(\theta_k) \tag{62a}$$

$$\overline{\frac{dx}{d\theta}}(\theta_k) = \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k) \tag{62b}$$

$$\sigma_{\overline{P_{\text{est}}}}(\theta_k) = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \left[P_{\text{est}}^i(\theta_k) - \overline{P_{\text{est}}}(\theta_k)\right]^2}}{{N_S}^*} \tag{63a}$$

$$\sigma_{\overline{dx/d\theta}}(\theta_k) = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \left[\frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k) - \overline{\frac{dx}{d\theta}}(\theta_k)\right]^2}}{{N_S}^*} \tag{63b}$$

onde $\overline{P_{\text{est}}}$ e $\overline{dx}/d\theta$ são as médias das partículas da pressão e da taxa de variação da fração mássica de combustível queimado, respectivamente, $\sigma_{\overline{P_{\text{est}}}}$ e $\sigma_{\overline{dx}/d\theta}$ são os desvios padrão das médias das partículas da pressão e da taxa de variação da fração mássica de combustível queimado, respectivamente, e ${N_S}^*$ é número de partículas cujo peso é não-nulo. Enfatiza-se que, nas Eqs. (62) e (63), os pesos já estão normalizados, isto é, sua soma é 1.

A pressão e a taxa de variação da fração mássica de combustível queimado do vetor de estado inicial $\mathbf{x}_0^i$ de cada partícula serão assumidos, respectivamente, como iguais à pressão medida, $P_{\text{est}}^i(\theta_0) = P_{\text{med}}(\theta_0)$, e como um número randômico de distribuição Gaussiana de média zero e uma variância ${\sigma_{\text{ini}}}^2$ pré-determinada, $dx^i/d\theta\ (\theta_0) \sim \text{N}[0, {\sigma_{\text{ini}}}^2]$. O valor será fixado por todo este trabalho como: $\sigma_{\text{ini}} = 0.001$.

É válido recordar-se que o modelo de combustão calcula a pressão na câmara de combustão entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de exaustão, isto é, quando o sistema pode ser considerado fechado. Pode-se definir então que o ângulo do virabrequim correspondente ao primeiro instante de tempo θ_0 da metodologia é o ângulo em que a válvula de admissão fecha e que, para o tempo final K, o ângulo θ_K é o ângulo de abertura da válvula de exaustão. O passo do ângulo d_θ é o mesmo que a resolução do sensor pertencente à bancada experimental, a ser descrita na próxima seção, usado para medir a pressão da câmara de combustão. Para calcular o ângulo do virabrequim para qualquer instante k, basta usar a simples expressão:

$$\theta_k = \theta_0 + d_\theta k \tag{64}$$

Portanto, agora tem-se o suficiente para a elaboração do algoritmo necessário para estimar a taxa de liberação de calor pelo combustível sem o uso de correlações de natureza empírica. O algoritmo está descrito na Tabela 4.

Tabela 4 - Algoritmo final para a estimativa da taxa de liberação de calor.

Passo 1 (Cálculo do vetor de estado inicial)
• Defina $k = 0$
• Para $i = 1, \ldots, N_s$:
  ○ Extraia um número randômico φ da distribuição $\mathrm{N}[0, {\sigma_{\mathrm{ini}}}^2]$
  ○ Obtenha o vetor de estado inicial: $\mathbf{x}_0^i = \{P_{\mathrm{med}}(\theta_0), \varphi\}$

Passo 2 (Predição)
• Para $i = 1, \ldots, N_s$:
  ○ Use o modelo de combustão para encontrar ${P_{\mathrm{est}}}^i(\theta_{k+1})$ por meio das Eqs. (58) e (59)
  ○ Use o modelo de *Random-Walk* para encontrar $dx^i/d\theta\ (\theta_{k+1})$ usando a Eq. (60)
  ○ Obtenha o novo vetor de estado: $\mathbf{x}_{k+1}^i = \left\{{P_{\mathrm{est}}}^i(\theta_{k+1}), dx^i/d\theta\ (\theta_{k+1})\right\}$

Passo 3 (Cálculo dos Pesos): • Atualize $k = k + 1$ • Para $i = 1, \ldots, N_s$:   ○ Use a função de verossimilhança para encontrar os pesos w_k^i usando as Eqs. (55) e (61)
Passo 4 (Normalização dos Pesos): • Calcule o peso total: $\tau = \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i$ • Para $i = 1, \ldots, N_s$:   ○ Normalize o peso: $w_k^i = w_k^i/\tau$

Passo 5 (Reamostragem):
• Construa a soma acumulativa de pesos (C*umulative Sum of Weights* – CSW) computando $c_i = c_{i-1} + w_k^i$ para $i = 1, \ldots, N_s$, onde $c_0 = 0$
• Defina $i = 1$
• Extraia o ponto de início u_1 da distribuição uniforme $\mathrm{U}\left[0, {N_s}^{-1}\right]$
• Para $j = 1, \ldots, N_s$:
  ○ Faça $u_j = u_1 + (j-1)/N_s$
  ○ Enquanto $u_j > c_i$: $i = i + 1$
  ○ Defina $x_k^j = x_k^i$
  ○ Defina $w_k^j = 1/N_s$

Passo 6 (Estimativas): • Calcule os valores médios e desvios padrão de cada variável do vetor de estado usando as Eqs. (62) e (63)

Passo 7 (Fim ou Retorno):
• Verifique se $\theta_k = \theta_K$:
  ○ Caso não, retorne ao Passo 2
  ○ Caso sim, finalize o algoritmo

Entretanto, pode-se perceber que no algoritmo há uma grande presença de números randômicos, o que pode fazer com que diferentes resultados sejam obtidos para os mesmos dados de entrada. Para garantir a convergência da metodologia, será usado um método similar ao de HAMILTON *et al.* (2014): o problema será resolvido N_{rep} repetidas vezes e os resultados do problema serão as médias dos resultados obtidos em cada uma das repetições:

$$[\overline{P_{\text{est}}}(\theta_k)]_{\text{conv}} = \frac{1}{N_{\text{rep}}} \sum_{r=1}^{N_{\text{rep}}} [\overline{P_{\text{est}}}(\theta_k)]_r \tag{65a}$$

$$\left[\overline{\frac{dx}{d\theta}}(\theta_k)\right]_{\text{conv}} = \frac{1}{N_{\text{rep}}} \sum_{r=1}^{N_{\text{rep}}} \left[\frac{dx^i}{d\theta}(\theta_k)\right]_r \tag{65b}$$

$$\left[\sigma_{\overline{P_{\text{est}}}}(\theta_k)\right]_{\text{conv}} = \frac{1}{N_{\text{rep}}} \sum_{r=1}^{N_{\text{rep}}} \left[\sigma_{\overline{P_{\text{est}}}}(\theta_k)\right]_r \tag{66a}$$

$$\left[\sigma_{\overline{dx}/d\theta}(\theta_k)\right]_{\text{conv}} = \frac{1}{N_{\text{rep}}} \sum_{r=1}^{N_{\text{rep}}} \left[\sigma_{\overline{dx}/d\theta}(\theta_k)\right]_r \tag{66b}$$

onde o subscrito conv se refere a resultados cuja convergência já está garantida e o índice r corresponde a resultados da r-ésima resolução do problema pela algoritmo final (Tabela 4). Neste trabalho, o valor de N_{rep} será fixado em 500, isto é, o problema será resolvido 500 retidas vezes garantir a convergência.

Com isso, é finalizada a apresentação da metodologia deste trabalho. Antes de usá-la, é extremamente importante o conhecimento do aparato experimental, o modo como os ensaios do motor marítimo diesel foram realizados e quais são os parâmetros que servirão como dados de entrada da metodologia. Isto será feito na próxima seção do trabalho.

4. Aparato Experimental

Nesta sessão, será descrita a bancada experimental e seus equipamentos mais importantes utilizados na obtenção das medições necessárias à resolução do problema inverso formulado para a estimativa Bayesiana da taxa de liberação de calor pelo combustível. É válido enfatizar que o autor deste trabalho não participou dos experimentos. Entretanto, devido à importância destes para o problema, é fundamental que esta descrição seja feita. Em adição, será explicado como foram obtidos os dados de entrada necessários ao uso do modelo de combustão.

4.1. O Motor Marítimo Diesel e a Bancada Experimental

Neste trabalho, serão utilizados os dados experimentais obtidos em testes de um motor marítimo diesel localizado na banca de testes *Bunker I* (Figura 2) do Laboratório de Máquinas Térmicas da Escola Politécnica/COPPE da Universidade Federal do Rio de Janeiro. Seu modelo é MAN Innovator 4C e foi adquirido pelo laboratório como parte de um projeto com a PETROBRAS para o teste de performance, características da combustão e níveis de emissão de óleos combustível pesados. Dentre estes, o mais importante a ser testado no motor é o *bunker*, o qual é usado em motores marítimos em alto mar, cujo principal problema são os níveis de emissão.

Figura 6 - Bancada de testes *Bunker I* do Laboratório de Máquinas Térmicas.

Entretanto, o uso de óleo marítimo diesel como combustível do motor marítimo é extremamente importante para ensaios iniciais e para a elaboração de metodologias de estudo e análise dos parâmetros de interesse. Isso se deve ao fato de o óleo marítimo diesel já ser bastante conhecido na literatura, o que não acontece para óleos combustíveis pesados. Além destes, planeja-se expandir a gama de combustíveis testados para misturas que contenham biocombustíveis para melhorar principalmente os níveis de emissões.

O motor marítimo diesel MAN Innovator 4C (Figura 7) é um motor de quatro tempos que possui 5 cilindros dispostos em linha e opera em regime estacionário a 1200 rpm. É um motor DI que possui ponto de injeção fixo e que, quando utiliza 100% de sua carga, é capaz de produzir $500\ kW$ de potência. Ele é equipado com um dispositivo turbocompressor cuja função é aumentar a massa específica do ar na admissão de modo a aumentar a vazão mássica que entra na câmara de combustão, o que melhora a eficiência volumétrica. O motor ainda possui um dispositivo *intercooler* que resfria o ar antes de ser admitido pelo cilindro. A diminuição da temperatura do ar irá aumentar sua massa específica e, assim como é feito pelo turbocompressor, também aumentará a eficiência volumétrica do motor.

Figura 7 - O motor marítimo diesel MAN Innovator 4C instalado na bancada *Bunker I*.

O motor ainda está equipado com sensores para medir a variação do ângulo do virabrequim e a pressão na câmara de combustão. Existem ainda sensores para medir a pressão na linha de combustível, o levantamento da agulha do bico injetor e os níveis de

emissões. A medição da variação do ângulo do virabrequim é feita pelo sensor eletromagnético Honeywell 3010AN, ilustrado na Figura 8. A medição da pressão na câmara de combustão é feita pelo sensor AVL GU21D, ilustrado na Figura 9, cujo princípio de medição é a piezoeletricidade, isto é, a geração de uma tensão elétrica em resposta a uma tensão mecânica (AVL, 2010). O acoplamento dos dois para a medição da pressão na câmara de combustão em função do ângulo do virabrequim permite a obtenção de dados a uma frequência de medição que implica em valores de pressão a cada 0.25°.

Figura 8 - Sensor (Honeywell 3010AN) de variação do ângulo do virabrequim.

Figura 9 - Sensor (AVL GU21D) de pressão na câmara de combustão.

4.2. Descrição dos Ensaios

Uma série de ensaios foi feita para o motor marítimo em questão operando com óleo diesel marítimo, à vista de sua anteriormente mencionada importância. Em cada uma das tomadas de dados, a pressão na câmara de combustão, a pressão na linha de injeção e o levantamento da agulha do bico injetor foram medidos em função do ângulo do virabrequim para ciclos completos (admissão-compressão-expansão-exaustão) e também o total dos níveis de emissão de materiais particulados, NO_x, CO, hidrocarbonetos não-queimados, entre outros poluentes.

As medições foram pós-processadas no *software AVL Indicom*, localizado em um computador na sala de controle da bancada *Bunker I* (Figura 10). Um dos parâmetros mostrados pelo *software* é a curva da taxa de liberação de calor pelo combustível, a variável de interesse deste trabalho. Contudo, ela é obtida por meio de um modelo derivado da Primeira Lei da Termodinâmica dos dados de pressão na câmara de combustão medidos (AVL, 2010) de modo similar ao método de HEYWOOD (1988)

para a identificação do ângulo de início da combustão, descrito na seção de revisão bibliográfica deste trabalho.

Figura 10 - Sala de controle da bancada *Bunker I*, foto retirada do site do Laboratório de Máquinas Térmicas (http://www.lmt.coppe.ufrj.br/, acessado em 15/02/2015).

Um total de três tomadas de dados foram feitas e, em cada uma, quatro cargas diferentes do motor (25%, 50%, 75% e 100%) foram consideradas e, para cada carga, 200 ciclos completos foram monitorados e medidos. Isto totaliza 800 ciclos medidos em cada tomada. Neste trabalho, serão utilizadas as medições da terceira tomada, pois nela o motor está mais quente, o que permite a obtenção de melhores resultados.

As Figuras 11-14 abaixo mostram a curva de pressão experimental na câmara de combustão para o ciclo médio da terceira tomada de cada carga. O ciclo médio é obtido pela média dos valores de pressão em cada ângulo do virabrequim para os 200 ciclos. É importante mencionar que $\theta = 0°$ representa o pistão no PMS ao final do tempo da compressão e no início do tempo de expansão.

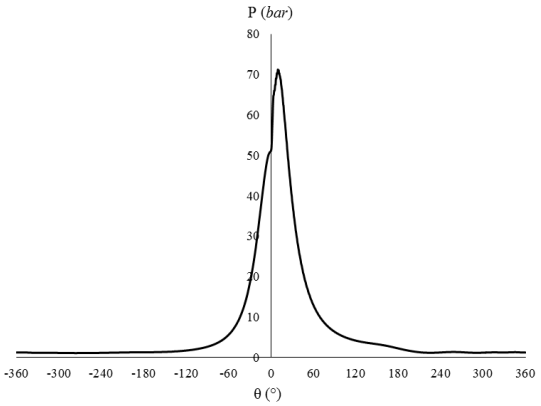

Figura 11 - Pressão experimental do ciclo médio para 25% de carga.

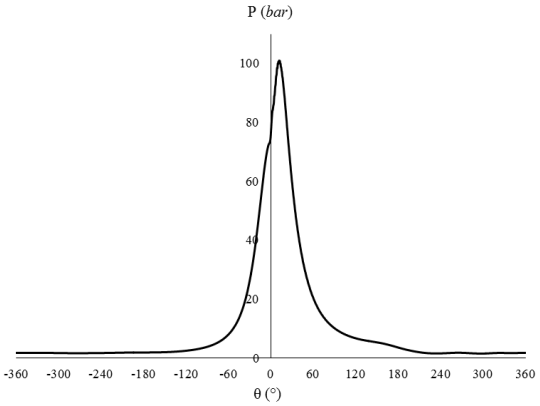

Figura 12 - Pressão experimental do ciclo médio para 50% de carga.

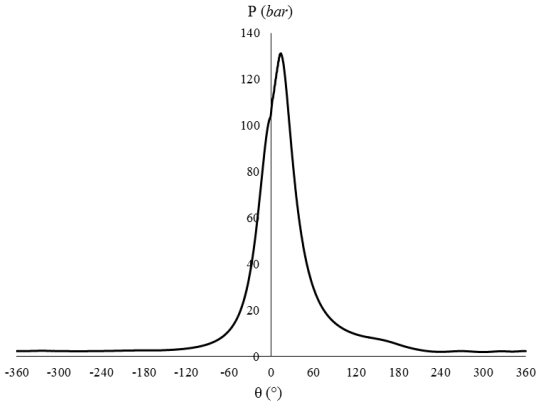

Figura 13 - Pressão experimental do ciclo médio para 75% de carga.

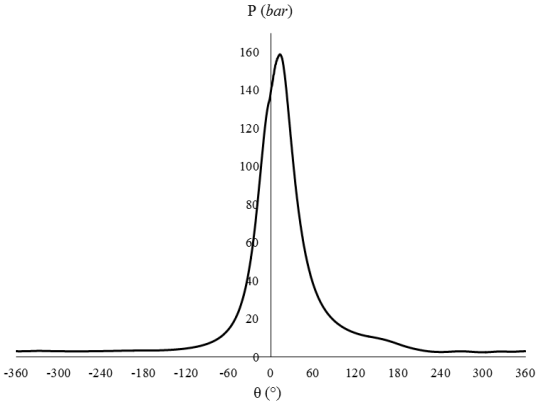

Figura 14 - Pressão experimental do ciclo médio para 100% de carga.

Nas Figuras 11-14 pode-se ver o aumento brusco da pressão na câmara de combustão que ocorre perto de 0° que indica o processo de combustão ocorrendo. Uma diferença interessante de se notar entre as curvas das quatro cargas é o fato de a combustão ocorrer de modo mais suave e contínuo para as cargas altas, em especial a de 100%, e de maneira mais brusca e descontínua nas cargas baixas, principalmente a de 25%. Como para cargas baixas, o atraso de ignição é maior devido a menores temperaturas residuais na câmara de combustão, o que implica em um maior tempo que o combustível leva para começar a queimar, a combustão pré-misturada será mais intensa que nas cargas altas, o que justifica essa maior descontinuidade da pressão para as cargas baixas. Além disso, o aumento da pressão nas cargas baixas devido à combustão se inicia quando a derivada da pressão devido ao ciclo motor está próxima de zero, o que intensifica ainda mais a descontinuidade da pressão nas cargas baixas. Com o aumento da carga e,

consequentemente, das temperaturas residuais da câmara de combustão, esse efeito diminui e a combustão passa a ocorrer de forma mais contínua.

4.3. Obtenção dos Dados de Entrada do Modelo de Combustão

Após a descrição da bancada experimental e da obtenção dos dados de pressão nos ensaios, é necessário fazer o levantamento dos parâmetros de operação, geométricos e do combustível. Estes serão usados no modelo termodinâmico empregado na metodologia para estimar a taxa de liberação de calor pelo combustível.

Sabe-se que o motor marítimo é de quatro tempos, logo: $n_R = 2$. Além disso, ele possui 5 cilindros, como já foi mencionado, cujos parâmetros geométricos podem ser encontrados no manual de instrução do motor (MAN Diesel & Turbo, 2010a). Esses parâmetros consistem no diâmetro dos cilindros, no curso total do pistão, no comprimento da biela e na razão de compressão, listados na Tabela 5.

Tabela 5 - Parâmetros geométricos de cada cilindro do motor marítimo (MAN Diesel & Turbo, 2010a).

B (diâmetro) $[mm]$	160
S (curso total do pistão) $[mm]$	240
L (comprimento da biela) $[mm]$	480
r_c (razão de compressão) $[-]$	15.2

Os ângulos de fechamento da válvula de admissão e de abertura da válvula de exaustão, isto é, os instantes inicial e final do problema inverso não-estacionário deste trabalho, devem ser obtidos. Em um documento fornecido pelo fabricante do motor, tais ângulos estão especificados para quando há ou não há folgas entre o cilindro e as válvulas, conforme mostra a Tabela 6.

Tabela 6 - Ângulos de fechamento da válvula de admissão e de abertura da válvula de exaustão.

	Fechamento da válvula de admissão	Abertura da válvula de exaustão
Com folgas	-146.5°	126.5°
Sem folgas	-126.0°	86°

Como as folgas nas válvulas são necessárias para diminuir tensões térmicas resultantes da dilatação daquelas durante a combustão, serão usados os valores de fechamento e abertura das válvulas de admissão e exaustão para quando há folgas.

Quanto ao poder calorífico inferior do óleo marítimo diesel, será usado o valor sugerido no manual de projeto do motor (MAN Diesel & Turbo, 2010b): $PCI = 42.7\ MJ/kg$. A temperatura nas paredes do cilindro, necessária para o uso da Lei de Resfriamento de Newton, Eq. (27), será assumida como a temperatura com a qual a água do sistema de arrefecimento sai das camisas do cilindro: $T_p = 80°C$ (MAN Diesel & Turbo, 2010a).

Dentre os parâmetros de operação do motor marítimo, a frequência de rotação em regime estacionário já é familiar: $N = 1200\ rpm$. Entretanto, não são conhecidas as vazões mássicas de ar e de combustível, principais variáveis que irão mudar com a carga. A vazão mássica de combustível injetada na câmara de combustão pode ser determinada através do consumo específico de combustível (*Specific Fuel Consumption* - SFC), cujos valores por carga estão listados na Tabela 7.

Tabela 7 - Consumo específico de combustível (SFC) por carga (MAN Diesel & Turbo, 2010b).

Carga	$SFC\ (g/kWh)$
25%	230
50%	199
75%	187
100%	188

Utilizando a equação abaixo, é possível determinar a vazão de combustível.

$$\dot{m}_{\text{comb}} = \dot{W}\ .SFC \tag{67}$$

onde $\dot{W}$ é a potência do motor operando com a mesma carga que o valor de SFC usado. Lembrando que a potência do motor operando com 100% de carga é de $500\ kW$, é possível descobrir as potências para as cargas de 25%, 50% e 75%: $125\ kW$, $250kW$ e $375\ kW$, respectivamente.

A vazão mássica de ar, por sua vez, só está especificada pelos manuais do motor para 100% de carga: $\dot{m}_{\mathrm{ar}} = 3275\ kg/h$ (MAN Diesel & Turbo, 2010a). Considerando-se então as vazões para esta carga, pode-se calcular a razão ar-combustível mássica pela sua definição:

$$A/C = \frac{\dot{m}_{\mathrm{ar}}}{\dot{m}_{\mathrm{comb}}} \tag{68}$$

a qual resulta em $A/C = 34.84$. Se assumirmos que A/C não varia com a carga do motor marítimo, podemos usar novamente a Eq. (68) para calcular a vazão de ar para as outras cargas.

A pressão da mistura ar-combustível no momento de fechamento da válvula de admissão, P_{adm}, é necessária para o uso da correlação de Woschni, Eqs. (43) e (44), e para a definição do vetor de estado inicial do problema inverso. Ela é tomada como igual à pressão experimental no ângulo do virabrequim em que ocorre o fechamento da válvula de admissão.

Com isso, os parâmetros de entrada que variam com a carga podem ser resumidos na Tabela 8.

Tabela 8 - Vazões e pressão na admissão para as quatro cargas do motor marítimo.

Carga	$\dot{m}_{\mathrm{comb}}\ (kg/h)$	$\dot{m}_{\mathrm{ar}}\ (kg/h)$	$P_{\mathrm{adm}}\ (bar)$
25%	28.75	1001.66	1.4005
50%	49.75	1733.31	1.9854
75%	70.50	2456.25	2.7896
100%	94.00	3275.00	3.6056

Anteriormente, foi mencionado que os sensores de pressão e de ângulo do virabrequim obtêm valores de pressão a cada 0.25°. À vista disso, define-se o passo do ângulo do virabrequim: $d_\theta = 0.25°$.

Para o cálculo da massa total da mistura ar-combustível, m_{tot}, é necessário conhecer o ângulo de início de injeção de combustível, θ_{SOI}. Usando os dados experimentais de levantamento da agulha do bico injetor e adotando o critério que θ_{SOI} equivale ao ângulo em que aquela sai de sua posição de repouso, é possível encontrar que $\theta_{\mathrm{SOI}} \approx -4°$. Lembrando que o motor em questão possui ponto de injeção fixo, o ângulo

de injeção encontrado é o mesmo para as quatro cargas. Entretanto, não é desejado usar nenhuma informação de como a combustão ocorre. À vista disso, um valor arbitrário e não-físico foi atribuído ao ângulo de injeção na utilização da metodologia deste trabalho: $\theta_{\mathrm{SOI}} = -30°$.

É importante enfatizar que, neste tópico, não foi feito o levantamento de nenhum parâmetro relacionado ao processo de combustão além do ângulo de injeção, pois, conforme já foi dito, na metodologia deste trabalho nenhum dado deste tipo será usado como entrada. O oposto é válido se a função de Wiebe fosse usada para representar a fração mássica de combustível queimado.

5. Resultados e Discussão

Nesta seção, serão mostrados os resultados da metodologia descrita neste trabalho para a taxa de liberação de calor pelo combustível do motor marítimo diesel anteriormente descrito para as quatro cargas usadas em seus ensaios de bancada (25%, 50%, 75% e 100%). Primeiramente, a identificação do ângulo de início de combustão usando as curvas de pressão experimentais é feita com quatro técnicas diferentes. Em seguida, é feita uma análise dos parâmetros arbitrários do modelo de *Random-Walk*, isto é, σ_b e σ_h, para a evolução da taxa de variação da fração mássica de combustível queimado na metodologia. Assim, se estaria avaliando quais valores irão prover os resultados mais satisfatórios. A influência do número de partículas usadas no filtro SIR também é verificada com ainda mais veemência. Em seguida, serão comparadas a pressão e a taxa de liberação de calor pelo combustível obtidas com a metodologia deste trabalho com aquelas obtidas com a metodologia tradicional, isto é, usando a função de Wiebe no modelo de combustão (problema direto). Por fim, com as curvas da taxa de liberação de calor obtidas, serão identificados o ângulo de início da combustão, para serem comparados com aqueles obtidos para as quatro cargas com as outras técnicas e as fases da combustão, que podem ser observados com os resultados obtidos com a metodologia deste trabalho, serão analisadas.

5.1. Identificação do Ângulo de Início da Combustão

Conforme já mencionado, o primeiro passo consiste na identificação do ângulo do virabrequim de início da combustão utilizando os dados de pressão obtidos nos experimentos anteriormente descritos para as quatro cargas do motor marítimo. Esses dados podem ser usados na validação dos resultados da metodologia do trabalho.

As técnicas de identificação do ângulo de início da combustão aqui usadas serão aquelas que o definem como o ângulo em que:

- Técnica 1: Há um máximo local na curva $d^2P/d\theta^2$ (LATA e MISTRA, 2011, ROTHAMER e MURPHY, 2013);
- Técnica 2: Há um máximo local na curva $d^3P/d\theta^3$ (KATRASNIK *et al.*, 2006);
- Técnica 3: Há um mínimo local na curva $d(\ln P)/d\theta$ (ZERVAS, 2005);

- Técnica 4: O processo deixa de ser politrópico (YOUNG e LIENESCH, 1978).

Foi anteriormente mencionado que a Técnica 4 é aplicada com o auxílio da curva $\ln P$ *vs.* $\ln V$. Assumindo o tempo de compressão como um processo politrópico, a seguinte equação é válida:

$$P_1 {V_1}^{n_p} = P_2 {V_2}^{n_p} \tag{69}$$

onde os índices 1 e 2 se referem a diferentes estados no processo e n_p é o expoente politrópico. Aplicando a logaritmo natural em ambos os lados da equação, pode-se chegar à seguinte expressão:

$$\frac{\ln P_2 - \ln P_1}{\ln V_2 - \ln V_1} = n_p \tag{70}$$

Pela Eq. (70) é possível concluir que o expoente politrópico é o coeficiente angular da curva $\ln P$ *vs.* $\ln V$. Durante a compressão, o expoente politrópico será constante e, consequentemente, a curva $\ln P$ *vs.* $\ln V$ será uma reta. Quando a combustão começar, ele mudará e $\ln P$ *vs.* $\ln V$ deixará de ser uma reta. Portanto, a Técnica 4 define o ângulo de início da combustão como aquele em que a curva $\ln P$ *vs.* $\ln V$ deixa de ser uma reta.

Foram programadas rotinas para a aplicação das técnicas que incluem como primeira etapa um tratamento dos dados de pressão. A presença do ruído de medição foi um dos desafios encontrados na aplicação das técnicas e o motivo pelo qual o tratamento de tais dados é necessário. Este problema se torna ainda mais grave quando as derivadas das Técnicas 1, 2 e 3 são calculadas por diferenças finitas, pois o ruído se amplifica. Para tratar os dados de modo a tornar a aplicação das técnicas mais simples foram utilizadas médias móveis e interpolação dos dados.

Primeiramente, as rotinas de cada uma das técnicas foram aplicadas para os ciclos médios de cada carga que, conforme já mencionados, foram obtidos pela média dos valores de pressão em cada ângulo do virabrequim para os 200 ciclos. Nas Figuras 15-18, pode-se ver as curvas referentes ao ciclo médio, já tratadas das maneiras explicadas anteriormente, usadas na aplicação de cada uma das técnicas para a identificação do ângulo de início da combustão. As figuras são todas referentes à carga de 100%, pois ela é aquela cuja identificação do início da combustão é um maior desafio, já que a combustão nela se dá de modo mais suave, conforme foi explicado anteriormente. Pela observação

das Figuras 15-17, nota-se que a aplicação das Técnicas 1, 2 e 3 pode ser um desafio devido à grande quantidade de máximos e mínimos locais em suas respectivas curvas. Portanto, na identificação do ângulo de início da combustão, foi considerado o primeiro máximo local, no caso das Técnicas 1 e 2, e o primeiro mínimo local, no caso da Técnica 3, após o ângulo de início da injeção θ_{SOI}, especificado na última seção como -4.0°.

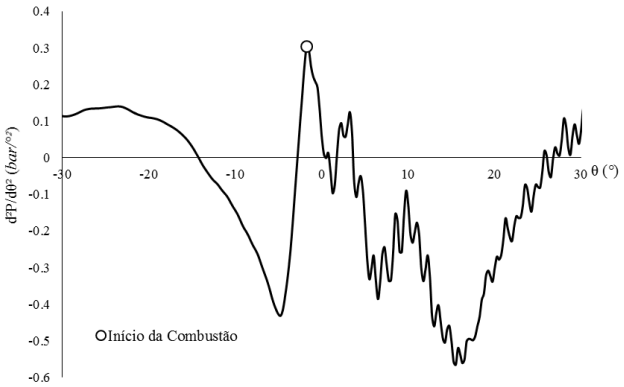

Figura 15 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 1.

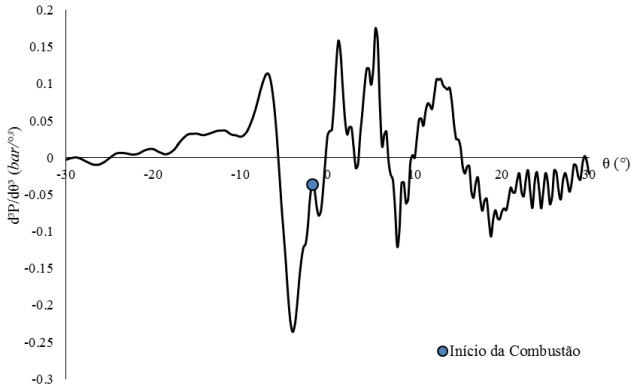

Figura 16 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 2.

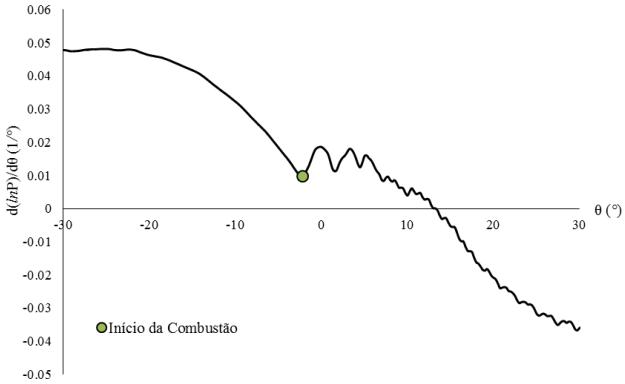

Figura 17 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 3.

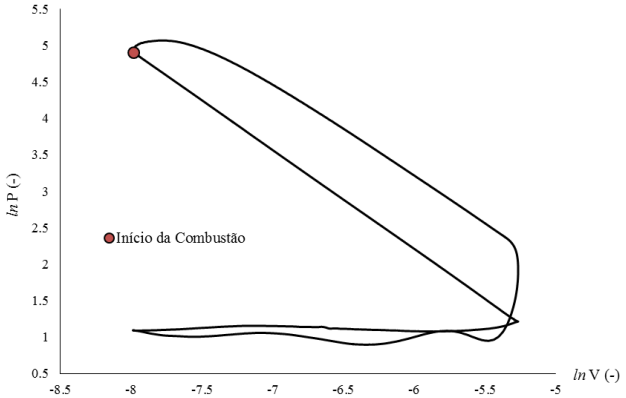

Figura 18 - Identificação do início da combustão para o ciclo médio de 100% de carga pela Técnica 4.

Para a mesma carga de 100%, é possível visualizar mais facilmente os quatro diferentes resultados para o ângulo de início da combustão na Figura 19.

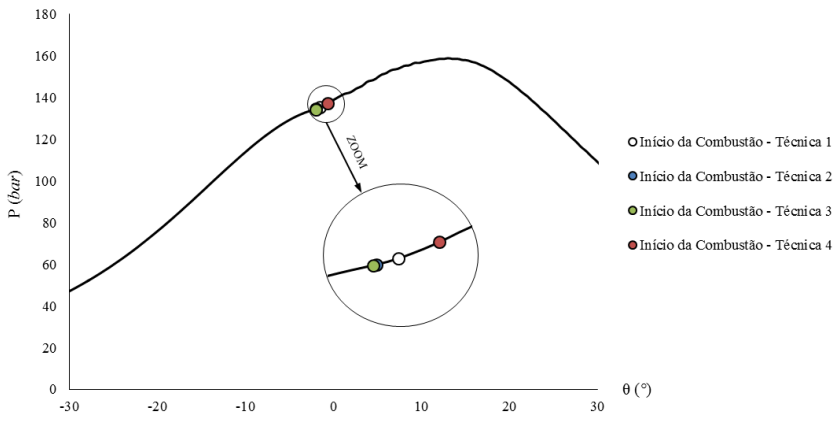

Figura 19 - Início da combustão obtido com diferentes técnicas para o ciclo médio de 100% de carga.

Após a verificação da correta identificação do início da combustão dos ciclos médios pelas rotinas implementadas, estas são aplicadas para todos os 200 ciclos de cada carga e a média e o desvio padrão dos ângulos de início da combustão obtidos são calculados. Os resultados para o ângulo de início da combustão, θ_{SOC},estão listados na Tabela 9, onde $\overline{\theta_{SOC}}$ é o valor médio e $\sigma_{\theta_{SOC}}$ o desvio padrão.

Tabela 9 - Resultados para o ângulo de início da combustão obtidos com as quatro técnicas.

Carga	Técnica 1		Técnica 2	
	$\overline{\theta_{SOC}}$ (°)	$\sigma_{\theta_{SOC}}$ (°)	$\overline{\theta_{SOC}}$ (°)	$\sigma_{\theta_{SOC}}$ (°)
25%	0.53	0.13	1.42	0.39
50%	-0.63	0.16	0.09	0.51
75%	-1.07	0.18	-0.99	0.59
100%	-1.52	0.61	-1.99	0.65
Carga	Técnica 3		Técnica 4	
	$\overline{\theta_{SOC}}$ (°)	$\sigma_{\theta_{SOC}}$ (°)	$\overline{\theta_{SOC}}$ (°)	$\sigma_{\theta_{SOC}}$ (°)
25%	-1.07	0.57	1.55	0.10
50%	-1.79	0.32	0.54	0.11
75%	-1.82	0.19	-0.03	0.13
100%	-2.04	0.93	-0.67	0.15

Na Tabela 9, observa-se que, para as Técnicas 1, 2 e 4, o desvio padrão dos resultados tende a crescer com a carga do motor utilizada. Isso se deve ao fato da combustão ocorrer de modo cada vez mais suave à medida que a carga cresce. Entretanto,

isso não é visto na Técnica 3, pois o desvio padrão também é altamente dependente de diversos parâmetros internos das rotinas, o que pode quebrar a tendência anteriormente citada, embora a carga de 100% tenha ainda apresentado o maior desvio padrão.

Os valores médios do ângulo de início da combustão, listados na Tabela 9, e os seus respectivos intervalos 95% de confiança podem ser mais facilmente visualizados na Figura 20.

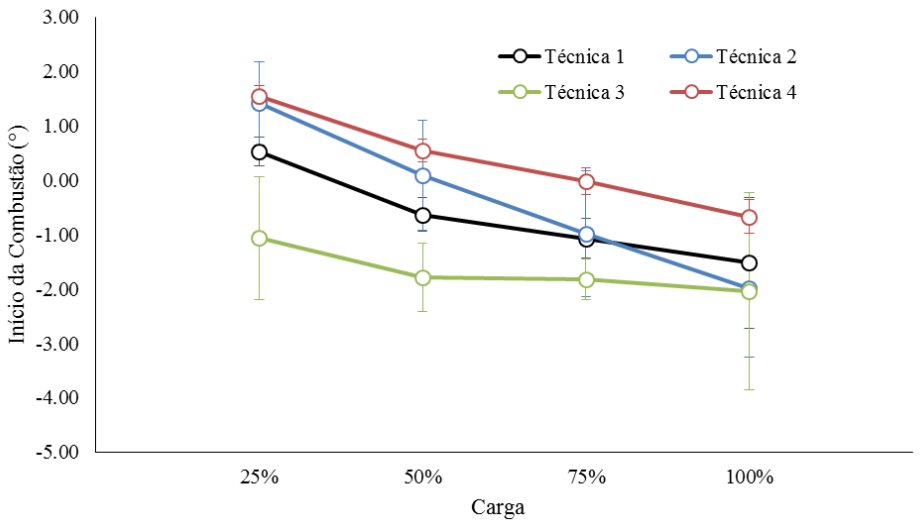

Figura 20 - Valores médios do ângulo de início da combustão e seus intervalos de 95% de confiança para quatro diferentes técnicas.

Na Figura 20, é possível ver que para todas as técnicas o ângulo de início da combustão decresce com o aumento da carga. Isto é o esperado (HEYWOOD, 1988), pois o atraso de ignição tende a diminuir com o aumento da carga, o que implica em menores ângulo de início da combustão, relembrando que o motor marítimo diesel considerado possui ponto de injeção fixa. Ainda, nota-se que as Técnicas 1, 2 e 4 obtiveram resultados similares, ainda mais considerando os intervalos de 95% de confiança. Entretanto, para as cargas de 25%, 50% e 75%, a Técnica 3 proveu resultados um pouco diferentes.

5.2. Análise da Influência dos Parâmetros do Modelo de *Random-Walk*

O modelo de Random-Walk, usado para a evolução no tempo de $dx^i/d\theta$ contida no Passo 2 do algoritmo final do trabalho descrito na Tabela 3, possui dois parâmetros arbitrários σ_b e σ_h, cujos valores devem ser selecionados empiricamente. Para isso, será

usada como referência a pressão da câmara de combustão estimada com a metodologia. Com o objetivo de avaliar o quão satisfatórios são esses resultados, será calculado erro quadrático médio e_{RMS} da pressão estimada para cada uma das 500 repetições de resolução do problema para garantir a convergência da metodologia. A seguinte expressão será usada para cada r-ésima repetição de uso do algoritmo final:

$$(e_{\mathrm{RMS}})_r = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^{K}\{[P_{\mathrm{est}}(\theta_k)]_r - P_{\mathrm{med}}(\theta_k)\}^2}{K}} \tag{71}$$

onde K é o número total de ângulos (ou instantes de tempo). É válido enfatizar que a pressão medida $P_{\mathrm{med}}(\theta_k)$ é dada pelo ciclo médio.

Das quatro cargas consideradas, a mais desafiadora para a metodologia deste trabalho estimar a taxa de liberação de calor pelo combustível é a de 25%, devido à presença de uma mais intensa combustão pré-misturada advinda de um também maior atraso de ignição. À vista disso, na avaliação dos parâmetros arbitrários do modelo de *Random-Walk*, somente os dados para 25% de carga serão utilizados.

Inicialmente, será selecionado o parâmetro de tendência, σ_b, que foi variado entre valores de diferentes ordens de grandeza. Nessa análise, o número de partículas do filtro SIR foi fixado em 1000, assim como o passo do modelo de *Random-Walk*, σ_h, em 0.1, devido a sua utilização por ESTUMANO *et al.* (2014a). Nas Figuras 21 e 22, estão plotados, respectivamente, a média e o desvio padrão do erro quadrático médio das 500 repetições da solução do problema em função dos valores assumidos para o parâmetro de tendência.

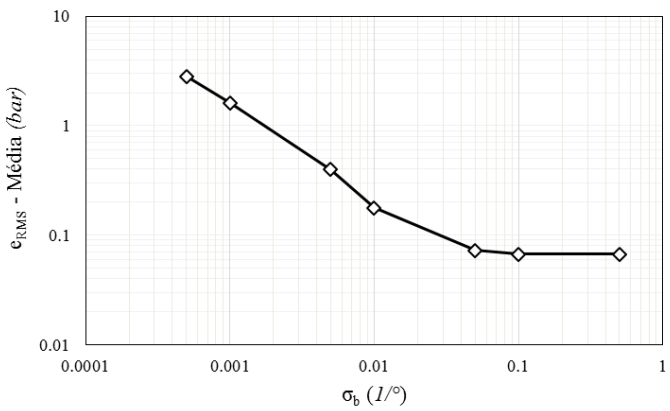

Figura 21 – Média do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do parâmetro de tendência.

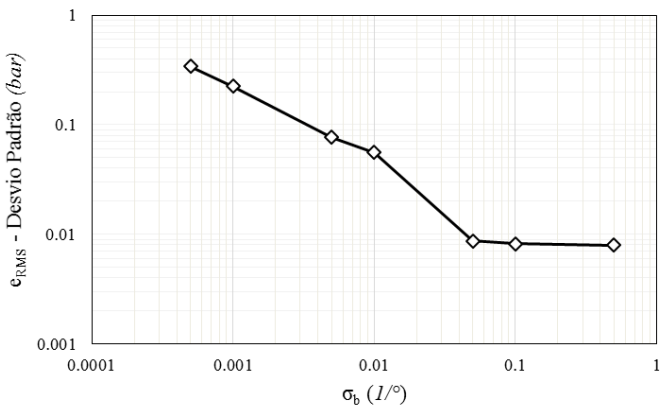

Figura 22 – Desvio padrão do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do parâmetro de tendência.

Observando as Figuras 21 e 22, vê-se que os valores do parâmetro de tendência que providenciaram estimativas mais precisas para a pressão foram 0.1 e 0.5. Para valores menores, a médio e o desvio padrão do erro quadrático médio crescem e, para valores maiores, o algoritmo final (Tabela 4) não funciona. Isto significa que o parâmetro de tendência a ser selecionado precisa possuir a mesma ordem de grandeza que 0.1 e 0.5. Selecionamos, então: $\sigma_b = 0.1$.

Em seguida, será selecionado o valor do passo do modelo de *Random-Walk*, σ_h. Novamente, será fixado o número de partículas do filtro SIR em 1000 e o valor do parâmetro de tendência recentemente selecionado será usado. Atribuindo valores de diferentes ordens de grandeza para σ_h, obtém-se, para cada um, a média e o desvio padrão do erro quadrático médio da pressão, plotados nas Figuras 23 e 24.

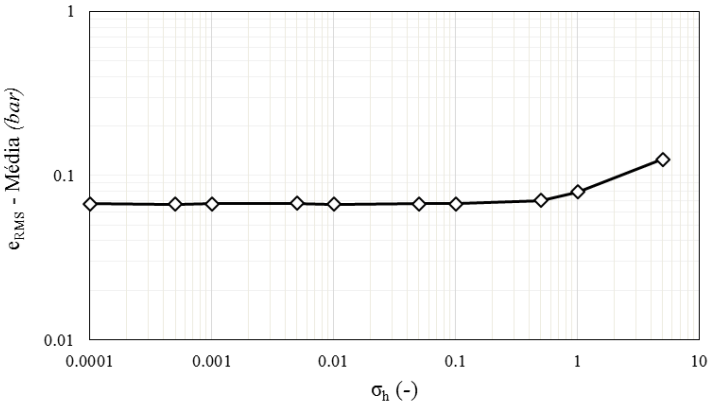

Figura 23 - Média do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do passo do modelo de *Random-Walk*.

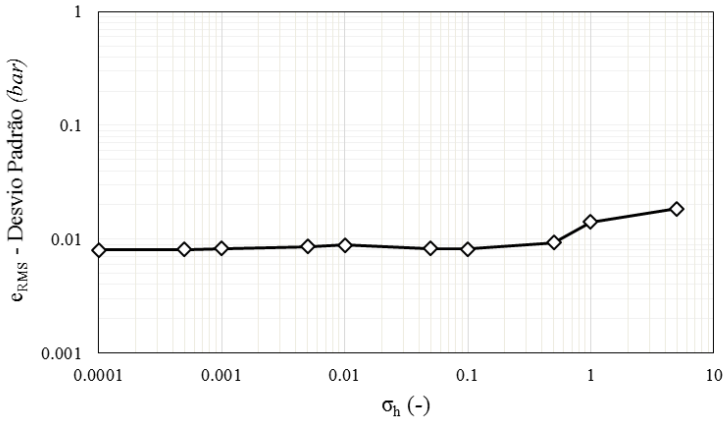

Figura 24 - Desvio padrão do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições em função do passo do modelo de *Random-Walk*.

É possível concluir, através das Figuras 23 e 24, que valores de σ_h entre 0.0001 e 0.1 fornecem resultados igualmente satisfatórios o que não pode ser dito acerca dos valores acima de 0.5. Como já foi dito, ESTUMANO *et al.* (2014a) usaram o valor de 0.1 para σ_h e, como foi comprovado que este valor fornece uma boa precisão para a metodologia, este mesmo valor será escolhido: $\sigma_h = 0.1$.

Com os valores de σ_b e σ_h já selecionados, no próximo tópico, será analisada a influência do número de partículas do filtro SIR nos resultados.

5.3. Análise da Influência do Número de Partículas

Neste tópico, será avaliado como diferentes números de partículas do filtro SIR, N_S, influenciam as estimativas de pressão na câmara de combustão e da taxa de liberação de calor pelo combustível. Nessa análise, serão usados os valores dos parâmetros do modelo de *Random-Walk* anteriormente selecionados: $\sigma_h = 0.1$ e $\sigma_b = 0.1$. Para cada carga, o número de partículas foi variado entre 10 e 10000, para abranger diversas ordens de grandeza. Além do erro quadrático médio da pressão estimada, também medimos o tempo de CPU gasto pelo algoritmo para um computador com um processador i7-4500U 1.80 GHz de 192 Mb de RAM (separados para a máquina virtual no qual o compilador do código em *Fortran* contendo o algoritmo final foi instalado).

Abaixo, as Figuras 25-27 ilustram, respectivamente, a média e o desvio padrão do erro quadrático médio da pressão e a média do tempo computacional das 500 repetições para as quatro cargas do motor marítimo diesel.

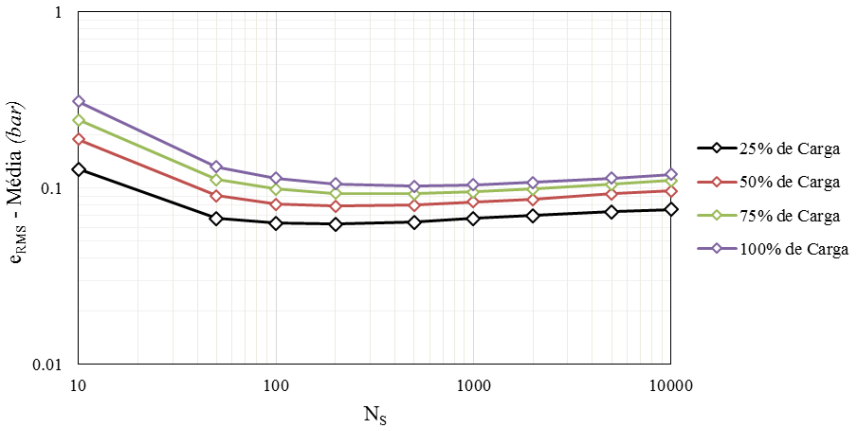

Figura 25 - Média do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições para as quatro cargas em função do número de partículas do filtro SIR.

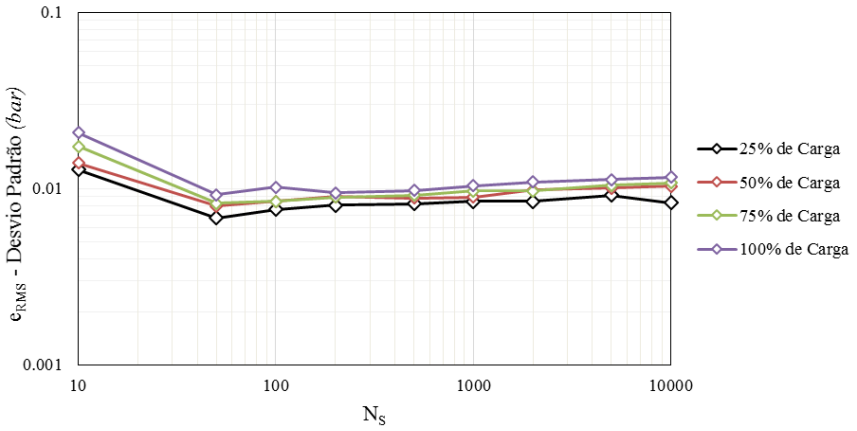

Figura 26 - Desvio padrão do erro quadrático médio da pressão estimada das 500 repetições para as quatro cargas em função do número de partículas do filtro SIR.

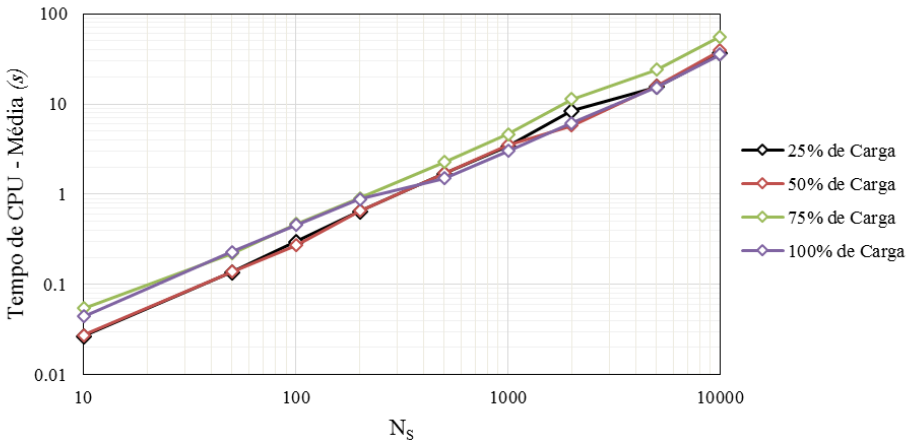

Figura 27 – Média do tempo de CPU das 500 repetições para as quatro cargas em função do número de partículas do filtro SIR.

Na Figura 25, é visto que, entre 10 e 200 partículas, o aumento de N_S torna as estimativas de pressão mais acuradas. Isso é esperado, pois a aproximação feita no filtro SIR, Eq. (54), estará se tornando mais precisa. Entretanto, a partir de cerca de 200 partículas, o aumento de N_S aumenta a divergência dos resultados com os dados experimentais. Embora não sendo algo indutivo, observações semelhantes foram constatadas por HAMILTON *et al.* (2014). Eles argumentaram que a razão deste fenômeno é o aumento da influência dos erros de arredondamento computacionais quando há um grande número de partículas. É verificado nesta mesma figura que o número de partículas cujos resultados são os mais precisos é de 200 e 500.

Na Figura 26, vê-se que o comportamento do desvio padrão do erro quadrático médio da pressão estimada em função do número de partículas é bastante similar ao da média. Por outro, lado, de acordo com esse gráfico, o número de partículas que forneceu resultados mais satisfatórios foi 50, embora 200 e 500 também apresentam valores de desvio padrão suficientemente pequenos.

Pode-se observar na Figura 27, que há um crescimento do tempo de CPU médio para as 500 repetições com o aumento do número de partículas. Entretanto, se for considerada apenas uma repetição, pequenos tempos computacionais serão associados a todos os números de partículas testados, sendo o maior deles 55.8 segundos para uma população de 10000. O tempo de CPU de 50 partículas é bem menor que o de 200 e o de 500, porém a média do erro quadrático médio destas populações é significativamente menor que a mesma de 50 partículas. Além disso, como o tempo de CPU de 200 partículas é menor do que o de 500, é avaliado que 200 partículas é o valor mais satisfatório para N_S, cujos resultados serão priorizados ao longo deste trabalho.

Posteriormente, os resultados de pressão e de taxa de liberação de calor serão analisados visualmente para diversas populações de partículas. Na Figura 28, vê-se a comparação da pressão experimental e a pressão estimada com a metodologia deste trabalho média e com um intervalo de 95% de confiança para 25% de carga e $N_S = 200$.

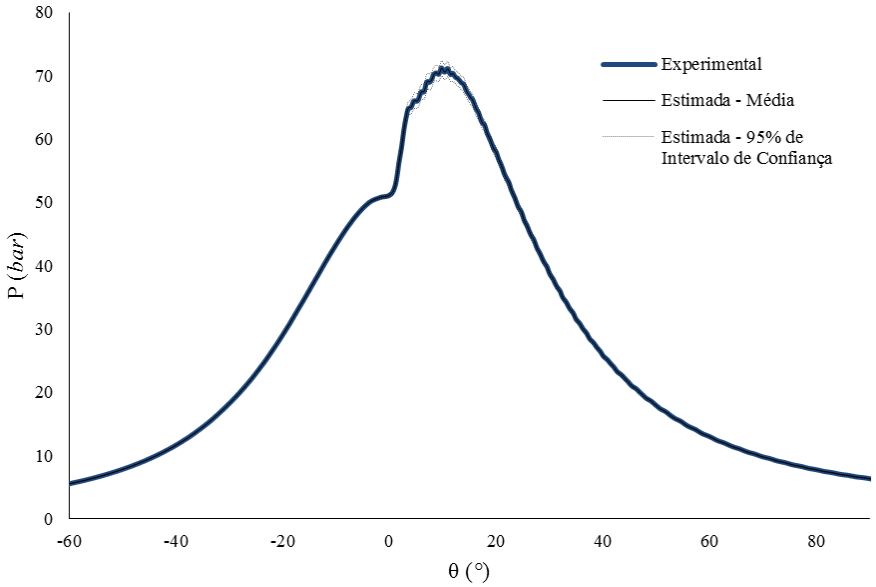

Figura 28 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 25% de carga.

É visto, na figura acima, que a metodologia obtém resultados de pressão com excelente concordância com os dados experimentais para 25% de carga. Para esta mesma carga, é possível visualizar a taxa de liberação de calor pelo combustível estimada com 10, 200, 1000 e 10000 partículas, respectivamente, nas Figuras 29, 30, 31 e 32.

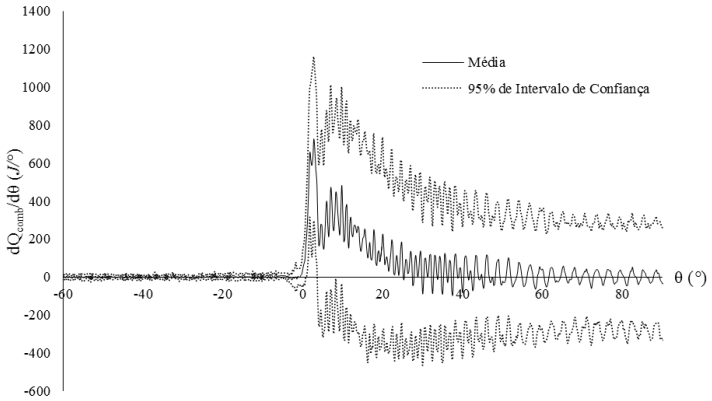

Figura 29 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 25% de carga.

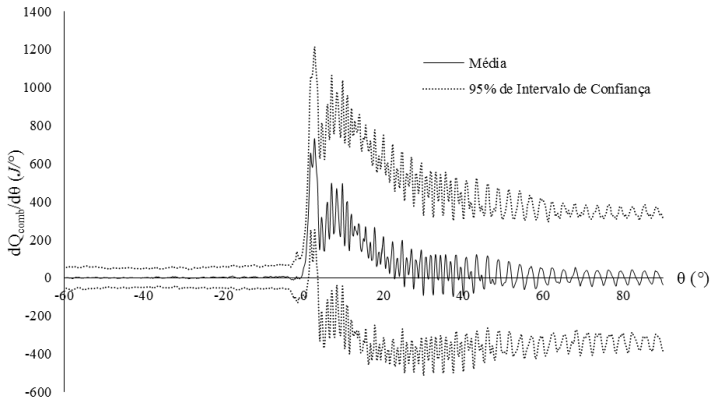

Figura 30 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 25% de carga.

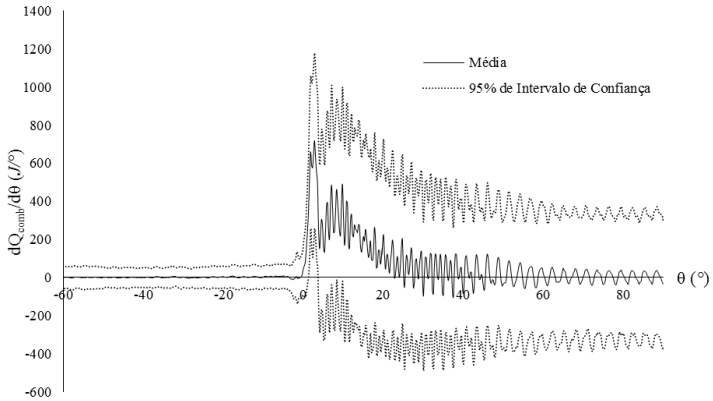

Figura 31 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 25% de carga.

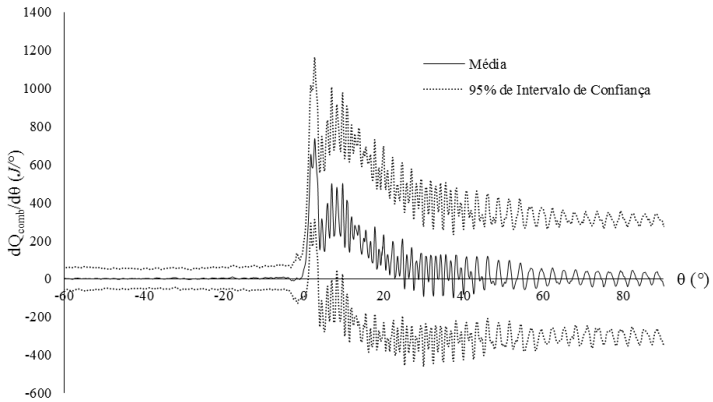

Figura 32 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 25% de carga.

Nas Figuras 29-32, pode-se ver que o número de partículas pouco influenciou nos valores médios, embora o intervalo de 95% de confiança possua a tendência de se tornar

maior com o aumento da população de partículas, devido ao aumento do desvio padrão dos resultados.

É possível observar, na Figura 33, a comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental, dessa vez para a carga de 50%. Nela, novamente constata-se as estimativas precisas da pressão na câmara de combustão obtidas via a metodologia aqui apresentada.

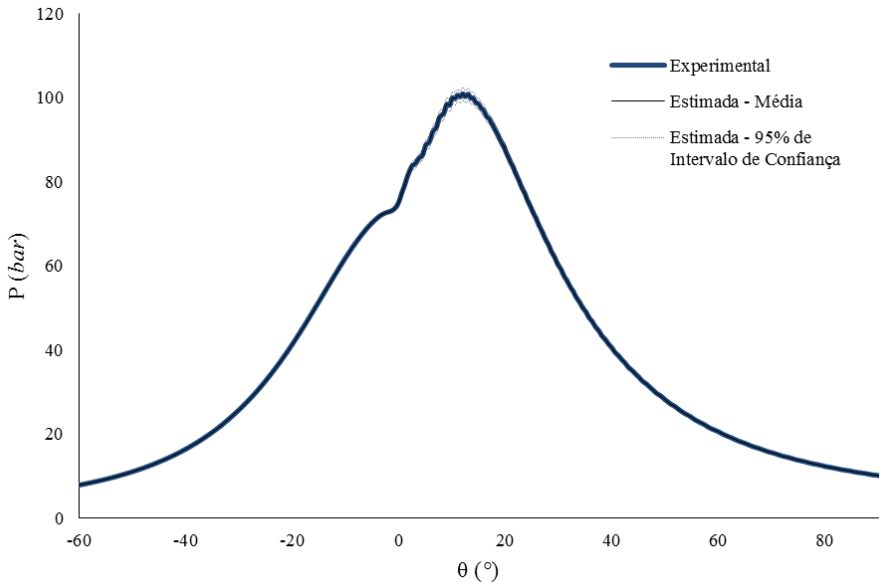

Figura 33 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 50% de carga.

Nas Figuras 34-37, encontram-se gráficos semelhantes aos das Figuras 29-32, porém para a carga de 50%.

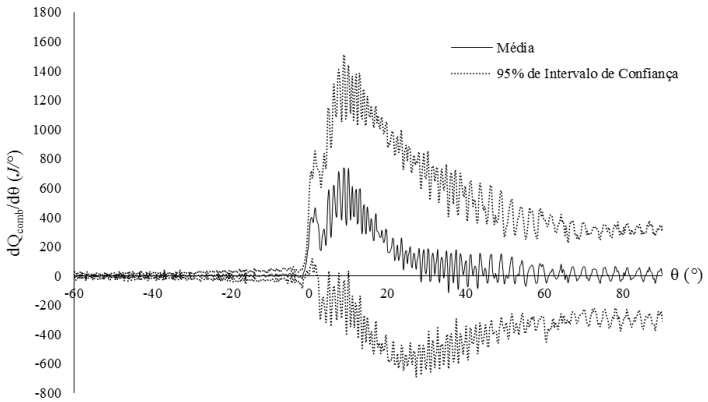

Figura 34 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 50% de carga.

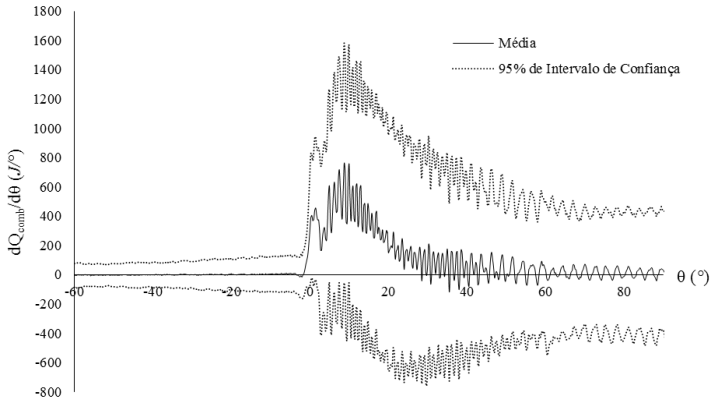

Figura 35 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 50% de carga.

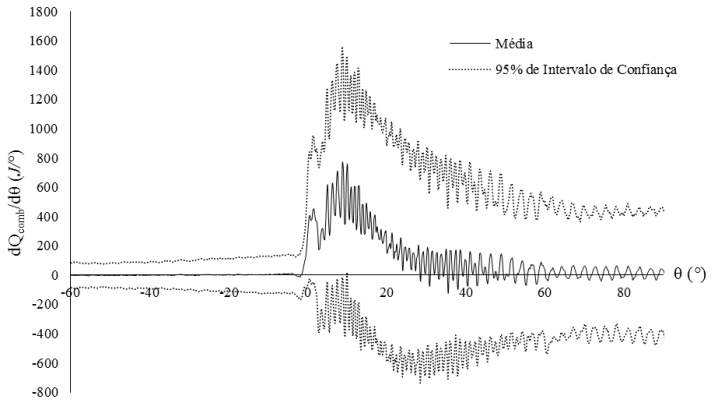

Figura 36 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 50% de carga.

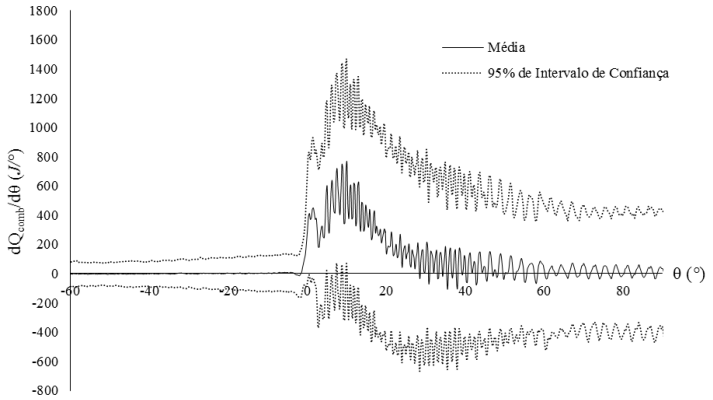

Figura 37 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 50% de carga.

Pode-se notar que o aumento do número de partículas de 10 para 200 (Figuras 34 e 35) aumentou o intervalo de 95% de confiança. Contudo, pouca diferença é vista entre

os resultados a partir de 200 partículas, o que reforça a eficiência do uso deste valor, também observada na Figura 25.

Aumentando a carga do motor para 75% e mais uma vez para 200 partículas, obtém-se uma pressão na câmara de combustão com ótima concordância com os dados experimentais, conforme visto na Figura 38.

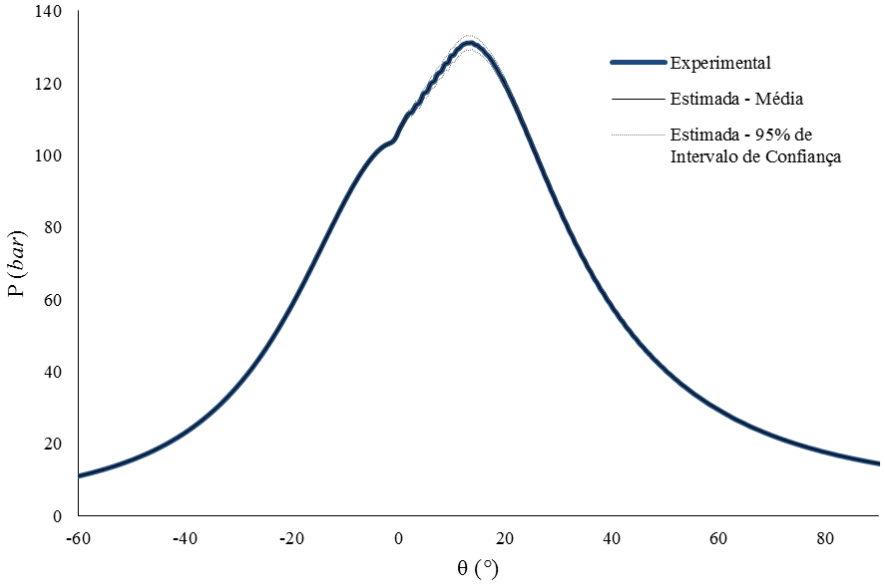

Figura 38 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 75% de carga.

Nas Figuras 39-42, está plotado a taxa de liberação de calor média e seu intervalo de 95% de confiança obtidos com a metodologia deste trabalho, para 10, 200, 1000 e 10000 partículas no filtro SIR.

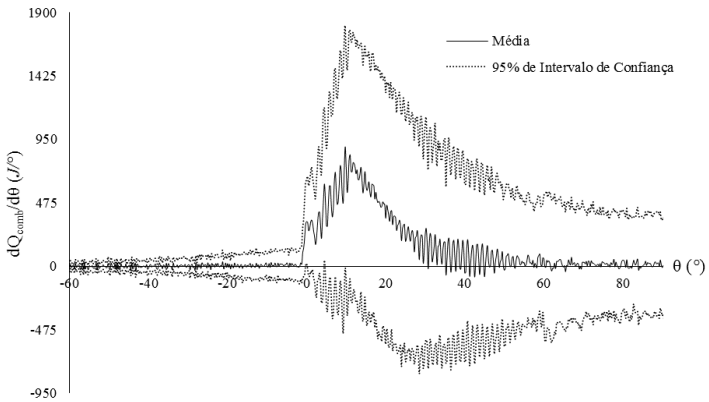

Figura 39 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 75% de carga.

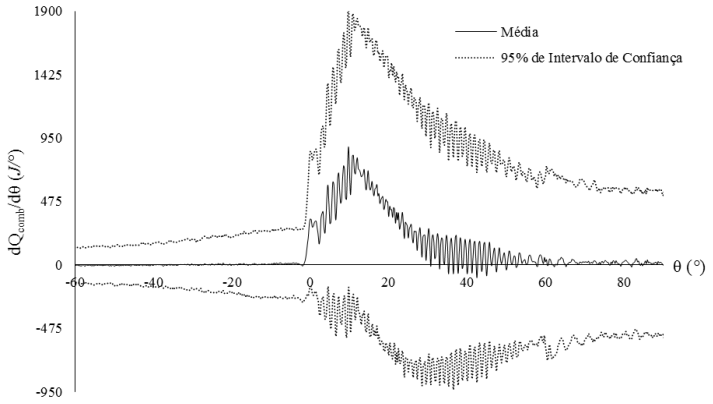

Figura 40 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 75% de carga.

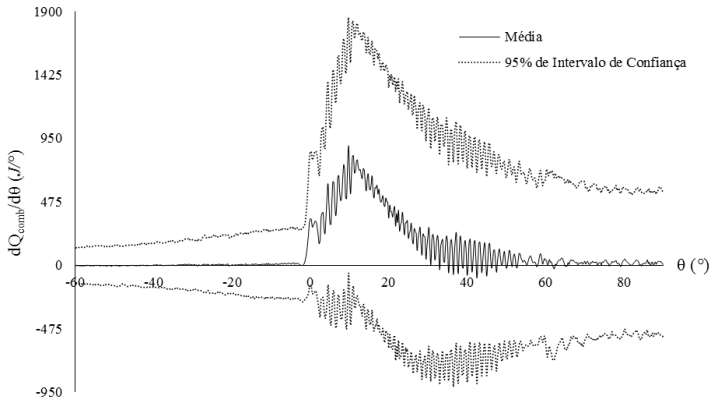

Figura 41 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 75% de carga.

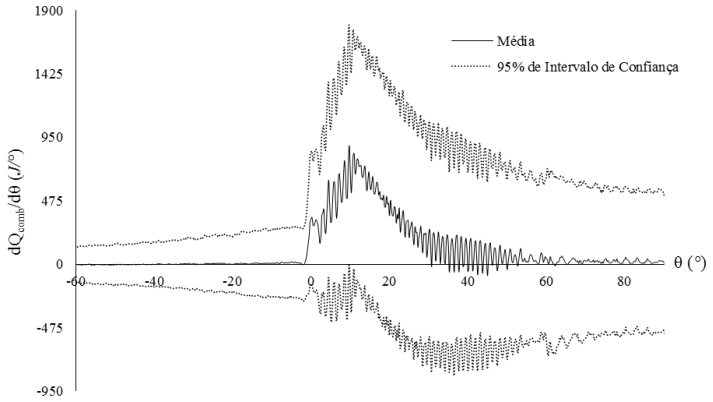

Figura 42 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 75% de carga.

Novamente, verifica-se que o número de partículas influencia os resultados apenas quando este é aumentado de 10 a 200 (Figuras 38 e 39). Existem diferenças desprezíveis entre os resultados das Figuras 40-42.

Para a carga de 100%, é ilustrada a pressão estimada com 200 partículas juntamente com a pressão do ciclo médio experimental (Figura 43). Observa-se mais uma vez uma equivalência bastante satisfatória entre os resultados.

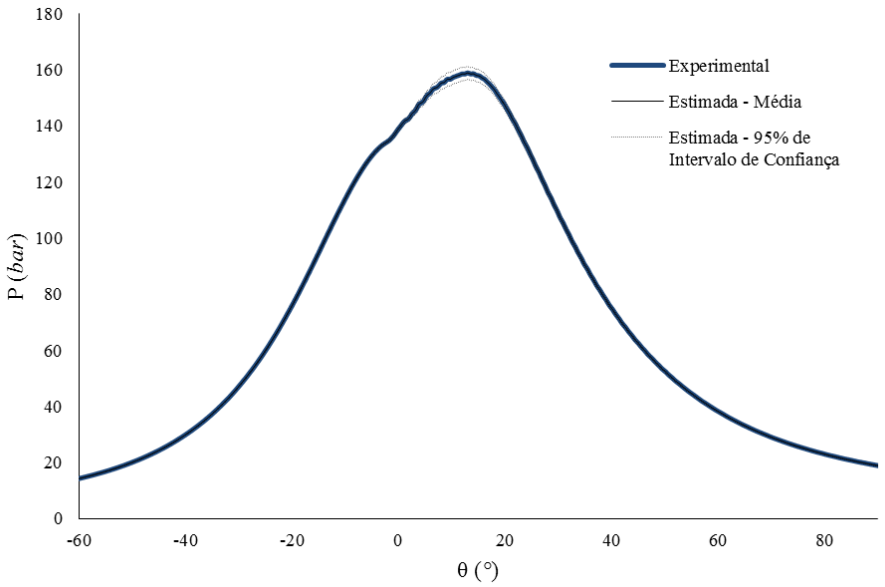

Figura 43 - Comparação entre a pressão estimada com 200 partículas e a experimental para 100% de carga.

Por fim, estão plotadas nas Figuras 44-47 a taxa de liberação de calor obtida com 10, 200, 1000 e 10000 partículas através da metodologia deste trabalho para 100% de carga.

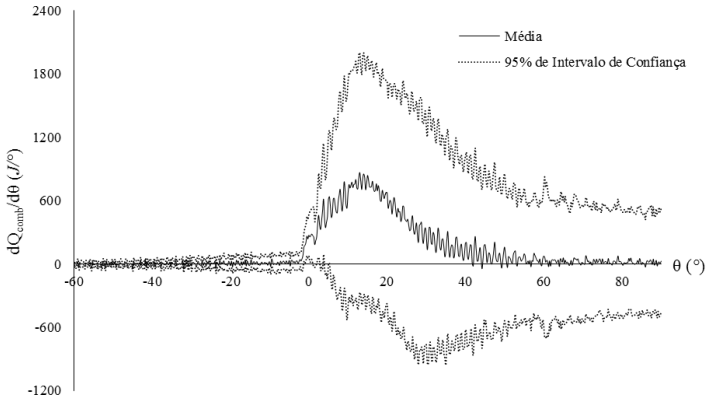

Figura 44 - Taxa de liberação de calor estimada com 10 partículas para 100% de carga.

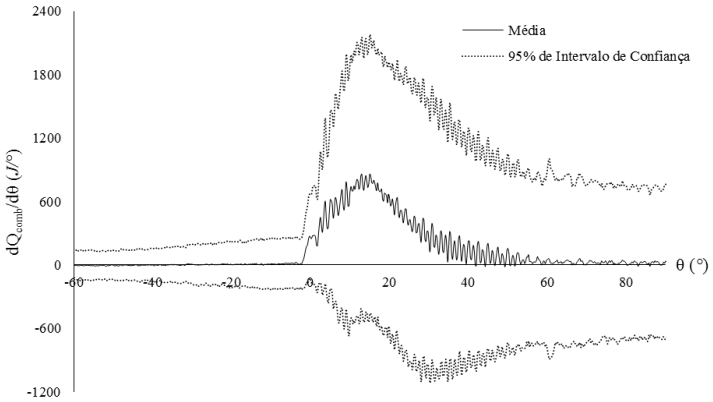

Figura 45 - Taxa de liberação de calor estimada com 200 partículas para 100% de carga.

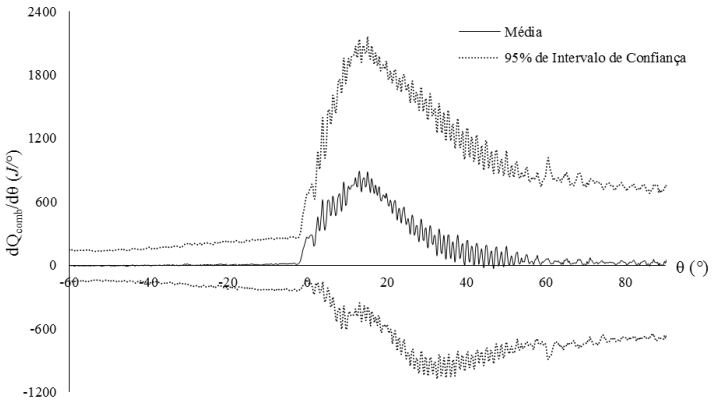

Figura 46 - Taxa de liberação de calor estimada com 1000 partículas para 100% de carga.

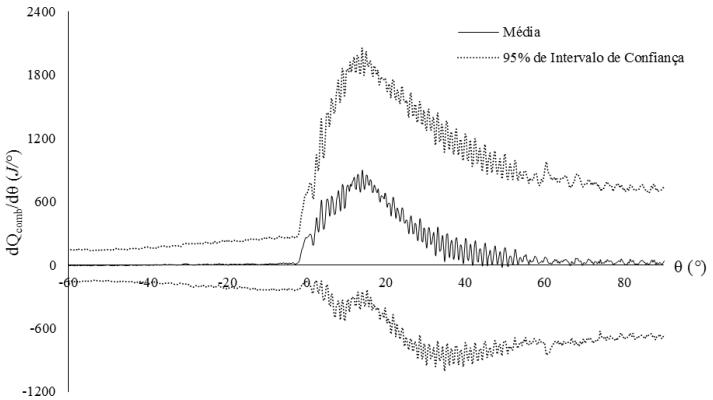

Figura 47 - Taxa de liberação de calor estimada com 10000 partículas para 100% de carga.

Nota-se que não há muita influência do número de partículas nos resultados da taxa de liberação de calor, exceto quando aumentamos de 10 partículas para 200, o que faz o intervalo de 95% de confiança aumentar.

Neste tópico, foi constatado que 200 partículas é um bom número a ser usado na estimativa da taxa de liberação de calor devido a seus bons resultados para a pressão, quantificados na Figura 25 e observados nas Figuras 28, 33, 38 e 43. Isso também é reforçado pelo fato de ter-se averiguado que o número de partículas não influencia tanto a taxa de liberação de calor estimada após 200 partículas, o que não pode ser dito da pressão, cuja estimativa tende a se tornar pior (Figura 25).

Nos resultados de taxa de liberação de calor, pode-se ver que há um grande ruído numérico nos resultados, especialmente na fase de combustão terminal. Entretanto, será visto que a metodologia deste trabalho consegue capturar bem o processo de combustão quando seus resultados foram comparados com os da metodologia tradicional.

5.4. Comparação com os Resultados da Metodologia Tradicional

Neste tópico, os resultados de pressão e de taxa de liberação de calor obtidos com a metodologia deste trabalho serão comparados com os da metodologia tradicional, que consiste em usar uma correlação empírica no modelo de combustão e ajustá-la usando os dados experimentais de pressão. A metodologia tradicional consiste no problema direto relativo ao problema inverso formulado.

Para isso, usaremos a função de Wiebe simples para descrever a fração mássica de combustível queimado e realizar o fechamento do modelo de combustão. Serão necessárias informações acerca do processo de combustão para o uso da função de Wiebe: o ângulo de início da combustão, sua duração e o ângulo de injeção. Este já foi especificado na seção anterior do trabalho como: $\theta_{\mathrm{SOI}} = -4°$. Para o ângulo do início da combustão θ_{SOC}, será utilizada a média dos mesmos calculados anteriormente pelas Técnicas 1, 2, 3 e 4. Para o cálculo da duração da combustão, $\Delta\theta$, é necessário determinar o ângulo em que a combustão terminar. Usando uma técnica baseada nas curvas de pressão experimental que identifica este ângulo como aquele em que a curva $d(\ln P)/d\theta$ possui um mínimo local (ZERVAS, 2005).

É importante lembrar que as constantes a e m da função de Wiebe precisam ser ajustadas usando os dados de pressão experimentais. Como a versão simples da função

está sendo usada, com um simples ajuste por tentativa e erro foi possível realizar a calibração.

A Tabela 10 resume os parâmetros extras necessários por carga para o uso da metodologia tradicional com a função de Wiebe simples.

Tabela 10 – Parâmetros extras necessários à metodologia tradicional.

Carga	θ_{SOI} (°)	θ_{SOC} (°)	$\Delta\theta$ (°)	a (−)*	m (−)*
25%	-4.0	0.605	33.577	7.0	0.8
50%	-4.0	-0.450	35.548	4.1	0.8
75%	-4.0	-0.975	34.153	2.7	0.8
100%	-4.0	-1.555	36.715	2.1	0.8

* Constantes já ajustadas.

Com isso, comparamos os resultados da metodologia deste trabalho (problema inverso) com a tradicional da literatura (problema direto) nas Figuras 48-55.

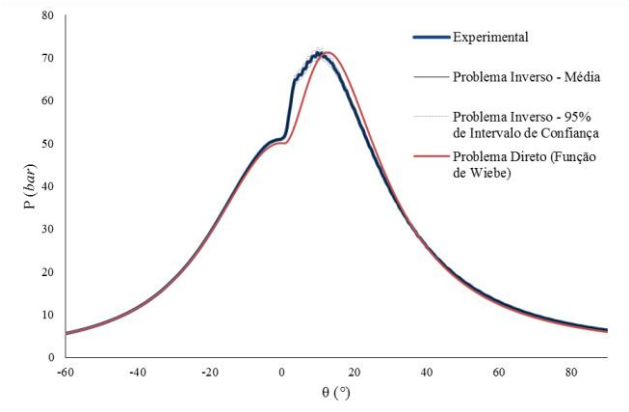

Figura 48 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 25% de carga.

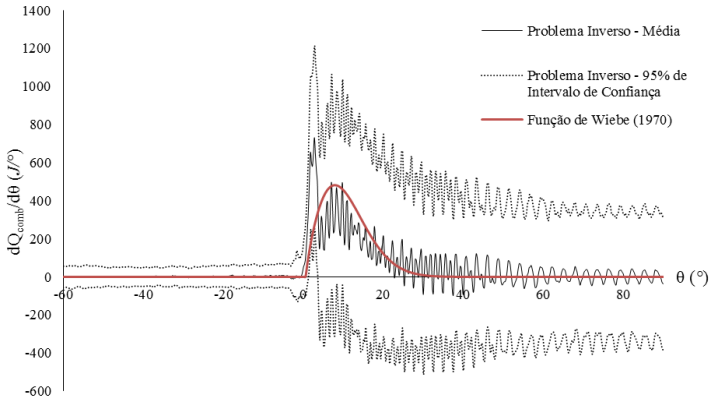

Figura 49 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 25% de carga.

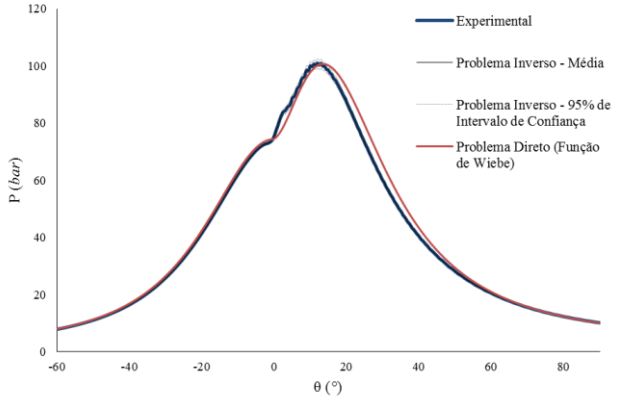

Figura 50 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 50% de carga.

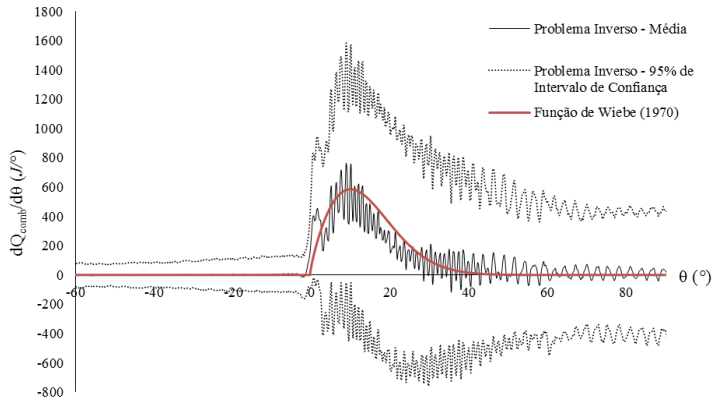

Figura 51 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 50% de carga.

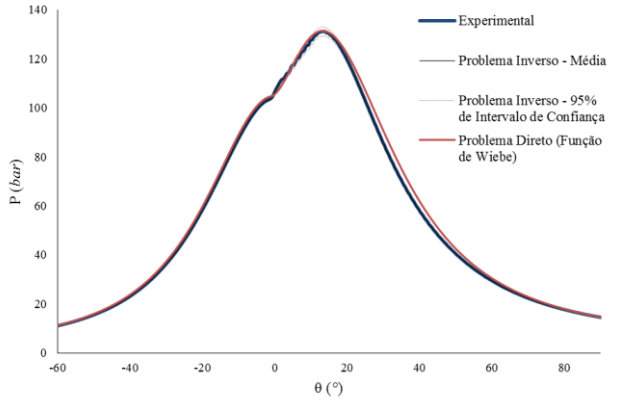

Figura 52 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 75% de carga.

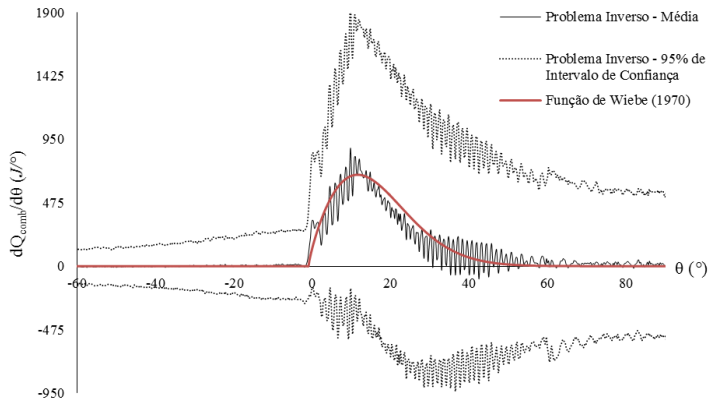

Figura 53 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 75% de carga.

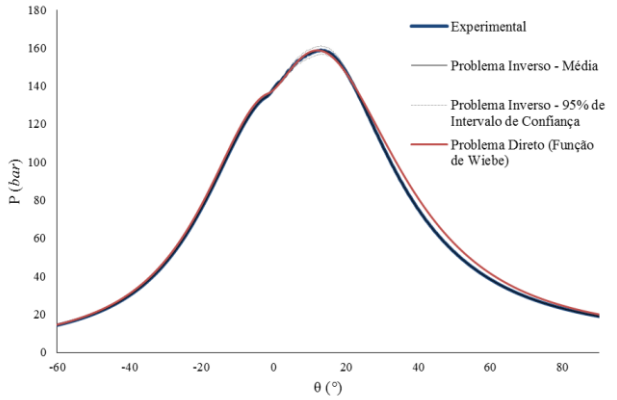

Figura 54 - Comparação da pressão experimental e das estimadas pelo problema inverso e direto para 100% de carga.

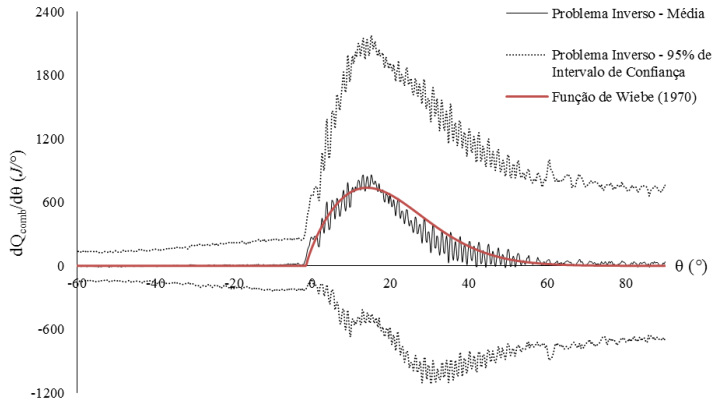

Figura 55 - Comparação da taxa de liberação de calor obtida pela metodologia do trabalho e pela função de Wiebe para 100% de carga.

Nas Figuras 48, 50, 52 e 54, pode-se ver que ambas as metodologias conseguem prever a pressão máxima na câmara de combustão. Por outro lado, a metodologia deste trabalho obteve um sucesso muito maior na previsão qualitativa da curva de pressão, especialmente para as cargas mais baixas, nas quais a contribuição da fase pré-misturada para a combustão é significativa. Nas Figuras 49, 51, 53 e 55, observa-se que a taxa de liberação de calor obtida com a metodologia deste trabalho possui o ruído numérico e os amplos intervalos de confiança como desvantagens frente à função de Wiebe. Entretanto, apesar de não usar nenhum dos parâmetros contidos na Tabela 10, a taxa de liberação de calor estimada pela abordagem Bayesiana concordou bem com a função de Wiebe para as cargas altas, nas quais a combustão pré-misturada é bem pequena e a combustão é quase inteiramente difusiva, e se mostrou melhor que a correlação nas cargas baixas. Isso se deve incapacidade da função de Wiebe simples em prever mais de uma fase na combustão, como acontece nas cargas baixas, pois nelas ambas as fases pré-misturada e difusiva são significativas.

Após a realização de uma comparação da metodologia deste trabalho com a tradicional, aquela será validada no tópico a seguir.

5.5. Validação com o Ângulo de Início da Combustão

Conforme mencionado na seção deste trabalho onde as técnicas de determinação do ângulo de início da combustão foram revisadas, é possível identificá-lo usando a curva da taxa de liberação de calor. Como esta foi estimada pela metodologia deste trabalho, ela será usada para determinar o ângulo de início da combustão e seus resultados serão comparados com aqueles obtidos com as Técnicas 1, 2, 3 e 4.

Na curva da taxa de liberação de calor média estimada, identificaremos o ângulo de início da combustão como aquele em que a inclinação da curva $\delta Q_{\mathrm{comb}}/d\theta$, isto é, $\delta^2 Q_{\mathrm{comb}}/d\theta^2$, passa de valores negativos para positivos após a injeção de combustível na câmara de combustão ($\theta_{\mathrm{SOI}} = -4.0°$). Esta técnica será referida como Técnica 5. Com isso, obtém-se o início da combustão para as quatro cargas, ilustrado nas Figuras 56-59, em que estão os resultados obtidos com 200 partículas no filtro SIR.

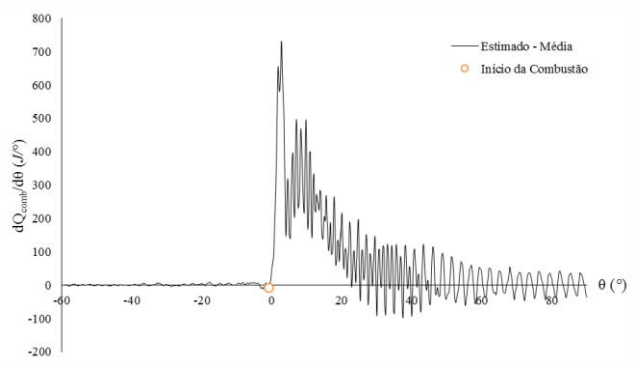

Figura 56 – Início da combustão pela Técnica 5 para 25% de carga.

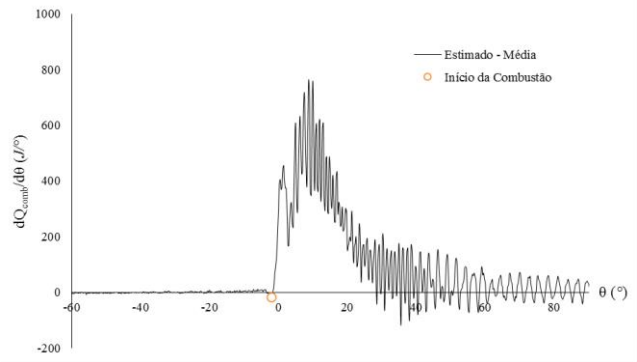

Figura 57 – Início da combustão pela Técnica 5 para 50% de carga.

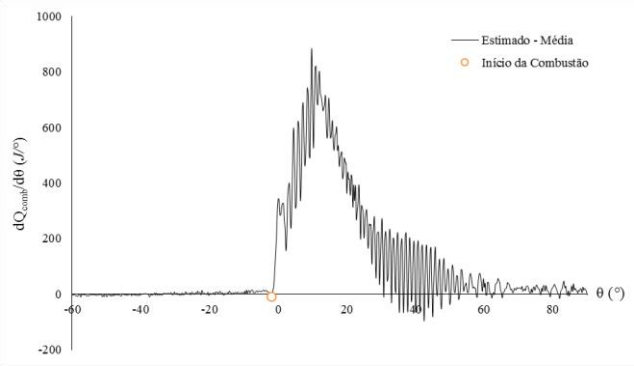

Figura 58 – Início da combustão pela Técnica 5 para 75% de carga.

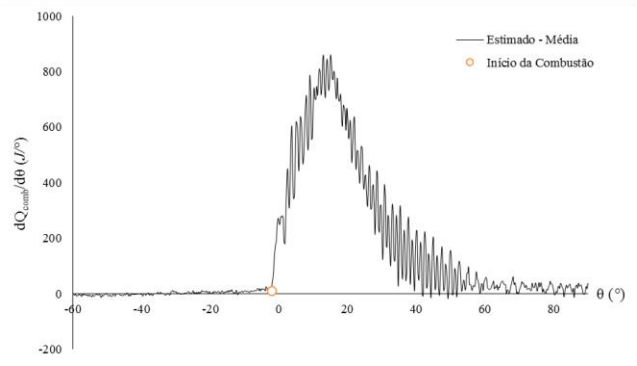

Figura 59 – Início da combustão pela Técnica 5 para 100% de carga.

Pelas Figuras 56-59, vê-se que a Técnica 5 consegue identificar com sucesso o início da combustão nas curvas estimadas da média da taxa de liberação de calor pelo combustível. Os resultados de θ_{SOC} para as cinco técnicas podem ser visualizados nos ciclos médios de cada carga, plotados nas Figuras 60-63.

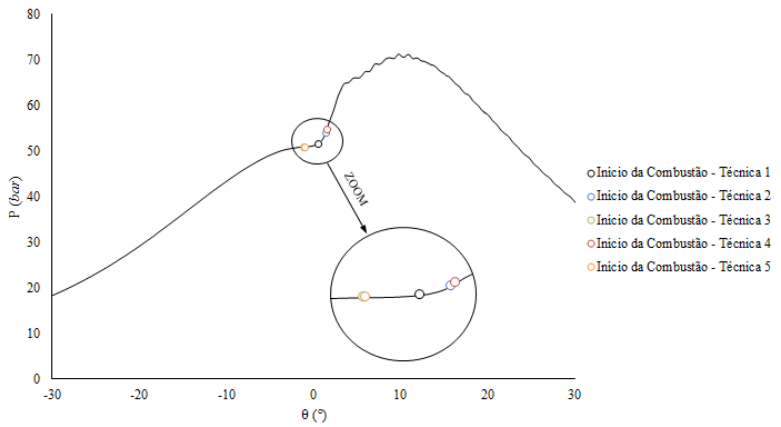

Figura 60 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 25%.

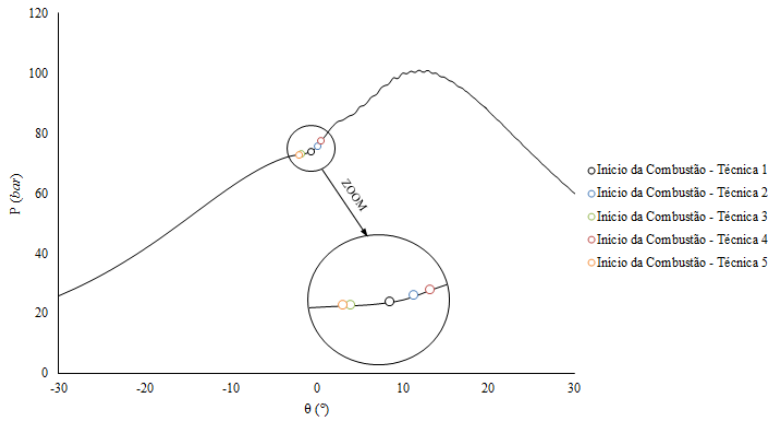

Figura 61 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 50%.

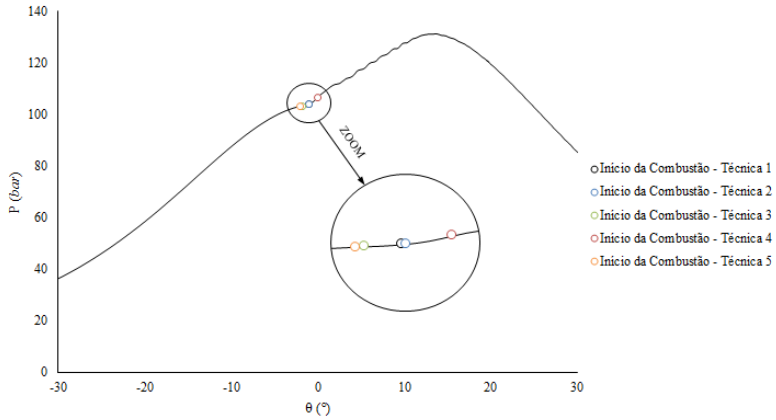

Figura 62 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 75%.

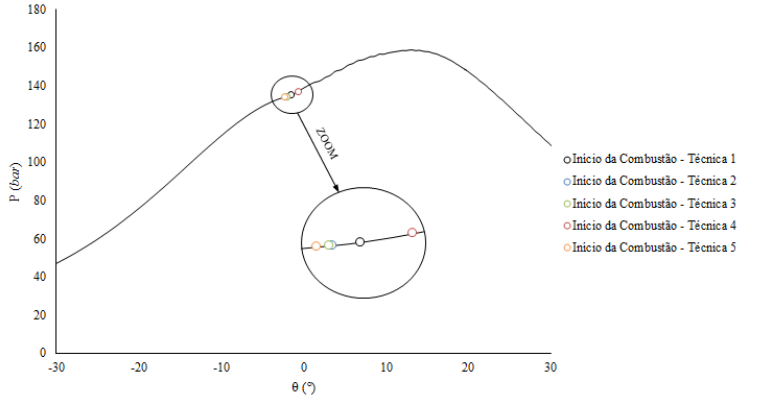

Figura 63 – Comparação do ângulo de início da combustão obtido por diversas técnicas diferentes no ciclo médio da carga de 100%.

Nas Figuras 60-63, é possível notar que o ângulo de início da combustão obtido através da curva estimada de taxa de liberação de calor (Técnica 5) é semelhante àqueles

obtidos com outras técnicas. Isso significa que a metodologia deste trabalho pode ser usada com sucesso na determinação do início da combustão, o que reforça sua utilidade no estudo da combustão não só do motor marítimo diesel em questão, mas de qualquer motor.

5.6. Análise das Fases da Combustão

Por fim, neste tópico as diferentes fases da combustão serão identificadas através da curva de taxa de liberação de calor estimada por 200 partículas no filtro SIR da metodologia deste trabalho. Anteriormente, foram determinados os ângulos de início da injeção e o de início da combustão. A variação do ângulo do virabrequim entre estes consiste no atraso de ignição, que é uma das fases da combustão. É válido lembrar que o início da combustão consiste no início da fase pré-misturada.

É possível encontrar o ângulo de início da fase difusiva da combustão ao buscar-se um mínimo local na curva de taxa de liberação de calor estimada após o "pico" referente a fase pré-misturada. Com isso, estarão definidos: o atraso de ignição, a fase pré-misturada e o início da fase difusiva. A fase terminal da combustão não foi considerada, devido a sua importância ser menor do que as outras três fases.

Esses resultados estão ilustrados para as quatro cargas nas Figuras 64-67.

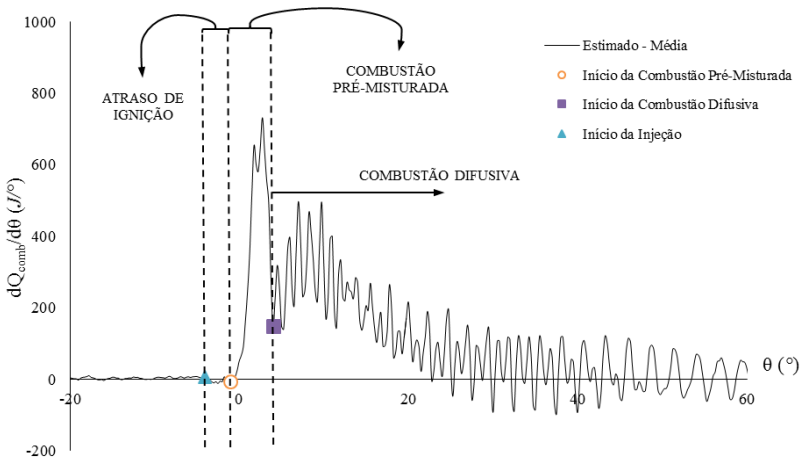

Figura 64 – Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 25% de carga com a metodologia do trabalho.

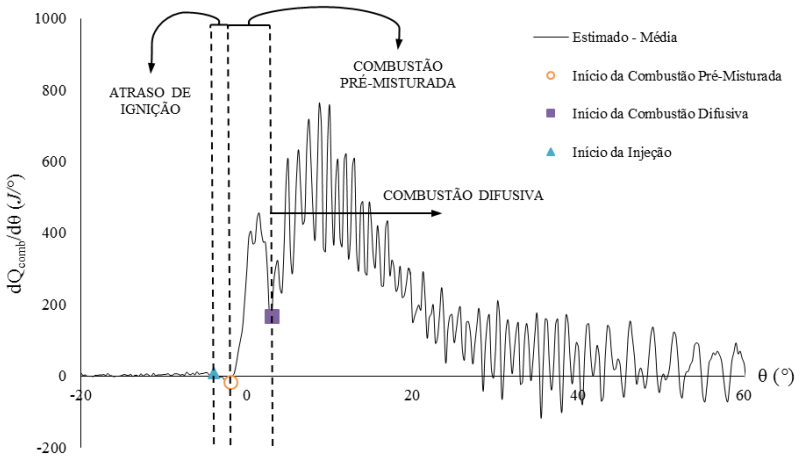

Figura 65 – Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 50% de carga com a metodologia do trabalho.

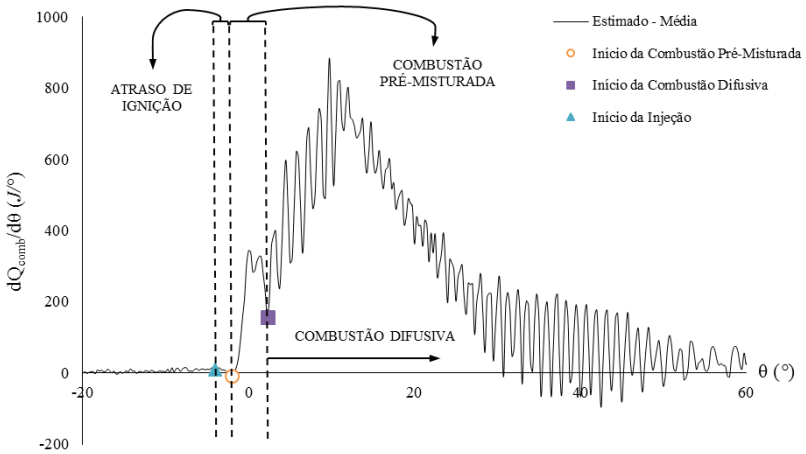

Figura 66 – Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 75% de carga com a metodologia do trabalho.

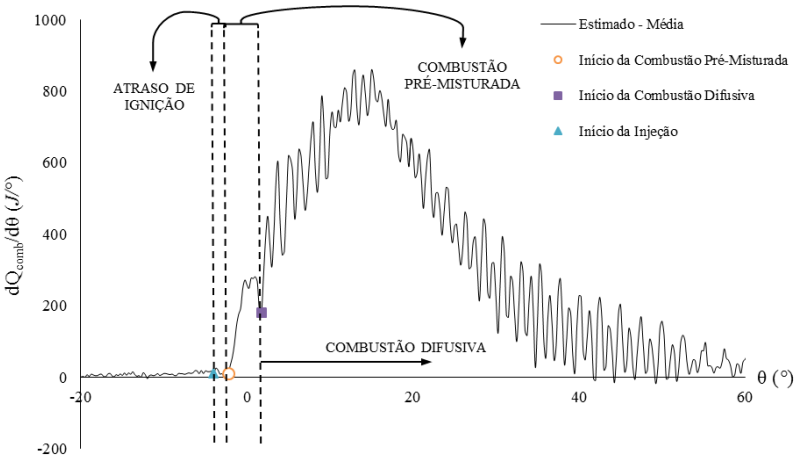

Figura 67 - Fases da combustão observadas a partir da taxa de liberação de calor estimada para 100% de carga com a metodologia do trabalho.

Pelas Figuras 64-67, pode-se ver que um aumento da carga provoca uma diminuição do atraso de ignição e também da intensidade e duração da combustão pré-misturada. São observações já esperadas, porém é interessante averiguar que os resultados da metodologia são capazes de prever de maneira tão satisfatória as fases da combustão.

É possível integrar as curvas das Figuras 64-67 com a regra dos trapézios (PRESS *et al.*, 1992) e usando os ângulos de início das fases pré-misturada e difusiva como limites de integração para determinar qual a porcentagem do calor total Q_{comb} liberado pelo combustível em cada fase, assumindo que a contribuição da fase terminal é desprezível. Estes resultados podem ser encontrados na Tabela 11.

Tabela 11 - Porcentagem do calor liberado pelo combustível em cada fase.

Carga	Q_{comb} – Pré-Misturada	Q_{comb} – Difusiva
25%	23.7%	76.3%
50%	10.4%	89.6%
75%	5.2%	94.8%
100%	3.5%	96.5%

Em uma última análise, somando as contribuições das fases pré-misturadas e difusiva para a integral de $\delta Q_{\text{comb}}/d\theta$, pode-se obter o calor total Q_{comb} liberado pelo combustível. Para validar este resultado para cada carga, ele é comparado com o valor total de energia contida no combustível injetado na câmara de combustão, dado $m_{\text{comb}}PCI$, o que é mostrado na Tabela 12.

Tabela 12 - Comparação do calor total obtido com a integral de $\delta Q_{comb}/d\theta$ com o calculado por $m_{comb}PCI$.

Carga	Calor total liberado pelo combustível		
	Integral de $\delta Q_{\text{comb}}/d\theta$ (J)	$m_{\text{comb}}PCI$ (J)	Erro Relativo
25%	6942	6820	1.79%
50%	11553	11802	2.11%
75%	16385	16724	2.03%
100%	21017	22299	5.75%

Na Tabela 12, constata-se que existem pequenas divergências entre os resultados das duas formas de calcular o calor total liberado, advindas da presença de ruídos

numéricos contidos nas taxas de liberação de calor estimadas pela metodologia deste trabalho. Isto acaba influenciando o cálculo da integral destas curvas, embora não provoque erros relativos de mais de 6%. Portanto, é possível afirmar que as duas formas de cálculo do calor total liberado pelo combustível se equivalem e que os resultados para a taxa de liberação de calor estimada pela metodologia deste trabalho foram verificados.

6. Conclusões

Neste trabalho, a combustão de um motor marítimo diesel operando com óleo diesel marítimo foi estudada usando as curvas de taxa de liberação de calor pelo combustível para quatro cargas diferentes (25%, 50%, 75% e 100%). Isso foi realizado através de uma metodologia na qual um modelo de combustão é usado na formulação por inversão estatística, ou abordagem Bayesiana, de um problema inverso não-estacionário o qual é solucionado com o auxílio do filtro de partículas SIR. Esta metodologia evita o uso de correlações empíricas para a descrição da fração mássica de combustível queimado e também a necessidade de conhecer informações *à priori* sobre a combustão.

Foi analisada a influência de diversos parâmetros da metodologia na estimativa de pressão e de taxa de liberação de calor para a constatação de quais fornecem os melhores resultados. Foi averiguado que esses são: $\sigma_b = 0.1$, $\sigma_h = 0.1$ e $N_S = 200$. Os resultados da metodologia tradicional (uso de uma correlação empírica para a fração mássica de combustível queimado em um modelo de combustão) foram comparados com os do presente trabalho. Foi constatado que, tanto para a pressão na câmara de combustão quanto para a taxa de liberação de calor pelo combustível, a metodologia deste trabalho fornece resultados mais satisfatórios. Além disso, os ângulos de início da combustão obtidos com as curvas estimadas de taxa de liberação de calor e com quatro técnicas contidas na literatura foram comparados e verificou-se que os ângulos obtidos das cinco formas se equivalem, o que indica que bons resultados foram fornecidos pela metodologia do trabalho e que esta é capaz de prever bem o início da combustão. Ainda, foram identificados o atraso de ignição, a combustão pré-misturada e o início da combustão difusiva nas curvas de taxa de liberação de calor obtidas com a metodologia. A única informação *à priori* acerca do processo de combustão necessária para a realização desta última análise foi o ângulo de injeção, θ_{SOI}, o que aponta para a força da metodologia no estudo da combustão. Por fim, a porcentagem do calor liberado pelo combustível em cada fase da combustão foi calculada e foi comparado o calor total liberado pelo combustível determinado pela integral das curvas estimadas de taxa de liberação de calor com a energia total contida no combustível injetado na câmara de combustão, dada por $m_{\mathrm{comb}}PCI$.

Com este trabalho, pode-se concluir que o uso da teoria de inversão estatística para a solução de problemas inverso não-estacionários é de fato uma ferramenta poderosa

para a análise de variáveis que não podem ser medidas. Com ela e ainda com o auxílio de um modelo termodinâmico zero-dimensional de combustão, foi possível estudar a combustão no motor marítimo diesel de modo extremamente satisfatório e com a minimização da necessidade de correlações empíricas e informações *à priori* acerca da queima do combustível.

6.1. Sugestões para Trabalhos Futuros

Em trabalhos futuros, sugere-se aplicar o filtro ASIR ao invés do filtro SIR, devido a suas vantagens observadas em trabalhos que foram revisados ne Seção 2. Espera-se que o filtro ASIR melhore ainda mais o tempo computacional da metodologia e também diminua o ruído numérico presente nos resultados da taxa de liberação de calor pelo combustível.

Uma segunda sugestão seria estimar simultaneamente o coeficiente de transferência de calor $h(\theta)$ entre a mistura ar-combustível e as paredes do cilindro, conforme feito por HAMILTON *et al.* (2014), e a taxa de liberação de calor pelo combustível. Nesse caso, o vetor de estado possuiria três elementos ao invés de dois, como neste trabalho e no de HAMILTON *et al.* (2014), e dois diferentes modelos de *Random-Walk* deveriam ser utilizados no passo de predição do algoritmo de solução. Assim, não haveria a necessidade de utilizar a correlação de Woschni no modelo de combustão, o que tornaria a metodologia completamente independente de correlações empíricas e semi-empíricas.

7. Referências

ABU-NADA, E., AL-HINTI, I., AL-SARKHI, A., *et al.*, 2006, "Thermodynamic Modeling of Spark-Ignition Engine: Effect of Temperature Dependent Specific Heats". ***International Communications in Heat and Mass Transfer***, v. 33, n. 10(Dez.), pp. 1264-1272.

ARRÈGLE, J., LÓPEZ, J.J., GARCÍA, J.M., *et al.*, 2003, "Development of a Zero-Dimensional Diesel Combustion Model. Part 1: Analysis of the Quasi-Steady Diffusion Combustion Phase". ***Applied Thermal Engineering***, v. 23, n. 11(Agosto), pp. 1301-1317.

ARRÉGLE, J., LÓPEZ, J.J., GARCÍA, J.M., *et al.*, 2003, "Development of a Zero-Dimensional Combustion Model. Part 2: Analysis of the Transient Initial and Final Diffusion Phases". ***Applied Thermal Engineering***, v. 23, n. 11(Agosto), pp. 1319-1331.

ARULAMPALAM, M.S., MASKELL, S., GORDON, N., *et al*., 2002. "A Tutorial on Particle Filters for Online Nonlinear/Non-Gaussian Bayesian Tracking". ***IEEE Transactions on Signal Processing***, v. 50, n. 2(Fev.), pp. 174-188.

AVL, 2010, ***AVL Engine Indicating: Indicating Basics and Typical Applications***, 1ª ed., Áustria.

AWAD, S., VARUVEL, E.G., LOUBAR, K., *et al.*, 2013, "Single Zone Combustion Modeling of Biodiesel from Wastes in Diesel Engine". ***Fuel***, v. 106(Abril), pp. 558-568.

BORMAN, G., NISHIWAKI, K., 1987, "Internal Combustion Engine Heat Transfer". ***Progress in Energy and Combustion Science***, v. 13, n. 1, pp. 1-46.

BODISCO, T., CHOY, S.L., BROWN, R.J., 2013, "A Bayesian Approach to the Determination of Ignition Delay". ***Applied Thermal Engineering***, v. 60, n. 1-2(Out.), pp. 79-87.

C.A.T.F., 2005, "Diesel and Health in America: the Lingering Threat". Disponível em: http://www.catf.us/resources/publications/files/Diesel_Health_in_America.pdf. Acesso em: 25 Fev. 2015.

CANOVA, M., GARCIN, R., MIDLAM-MOHLER, S., *et al.*, 2005, "A Control-Oriented Model of Combustion Process in a HCCI Diesel Engine". In: *Proceedings of the 2005 American Control Conference*, pp. 4446-4451, Portland, Oregan, 9-10 Junho.

COLAÇO, M.J., TEIXEIRA, C.V., DUTRA, L.M., 2010, "Thermodynamic Simulation and Optimization of Diesel Engines Operating with Diesel and Biodiesel Blends Using Experimental Data". ***Inverse Problems in Science and Engineering***, v. 18, n. 6(Junho), pp. 787-812.

COLAÇO, M.J., ORLANDE, H.R.B., SILVA, W.B., *et al.*, 2012, "Application of Two Bayesian Filters to Estimate Unknown Heat Fluxes in a Natural Convection Problem". ***Journal of Heat Transfer***, v. 134, n. 9(Julho), 092501.

DAPENA, P.V., 2009, “Special Report - Getting Real: The High Cost of Electric Cars”. CNN. Disponível em: http://money.cnn.com/2009/01/15/autos/bcg_electric_car_report/. Acesso em: 20 Fev. 2015.

DESCIEUX, D., FEIDT, M., 2007, “One Zone Thermodynamic Model Simulation of an Ignition Compression Engine”. ***Applied Thermal Engineering***, v. 27, n. 8-9(Junho), pp. 1457-1466.

DUTRA, L.E.D., 2014, “Biocombustíveis no Brasil”. Palestra dada ao PRH37/ANP, COPPE/UFRJ.

ESTUMANO, D.C., HAMILTON, F.C., COLAÇO, M.J., 2014, *et al.*, “Bayesian Estimate of Mass Fraction of Burned Fuel in Internal Combustion Engines Using Pressure Measurements”. *4th International Conference on Engineering Optimization*, 5651, Lisboa, Portugal, 8-11 Setembro.

ESTUMANO, D.C., COLAÇO, M.J., ORLANDE, H.R.B., *et al.*, 2014, “Parameter Identification in Combustion Processes Using Bayesian Techniques”. *15th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering*, Belém, Pará, Brasil, 10-13 Novembro.

GHOJEL, J.I., 2010, “Review of the Development and Applications of the Wiebe Function: a Tribute to the Contribution of Ivan Wiebe to Engine Research”. ***International Journal of Engine Research***, v. 11, n. 4(Agosto), pp. 297-312.

GORDON, N., SALMOND, D., SMITH, A.F.M., 1993, “A Novel Approach to Nonlinear and Non-Gaussian Bayesian State Estimation”. ***Proceedings of the Electrical Engineering Institute***, v. 140, n. 2(Abril), pp. 107-113.

GUPTA, H.N., 2013, ***Fundamentals of Internal Combustion Engines***. 2ª ed, PHI Learning Private, India.

HAMILTON, F.C., CARVALHO, R.N., COLAÇO, M.J., *et al.*, 2012, “Heat Transfer Coefficient Estimation of an Internal Combustion Engine Using Particle Filters”. *3th International Conference on Engineering Optimization*, Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil, 01-05 Julho.

HAMILTON, F.C., COLAÇO, M.J., CARVALHO, R.N., *et al.*, 2014, “Heat Transfer Coefficient Estimation of an Internal Combustion Engine Using Particle Filters”. ***Inverse Problems in Science and Engineering***, v. 22, n. 3(Abril), pp. 483-506.

HAMMERSLEY, J.M., HANSCOMB, D.C., 1964, ***Monte Carlo Methods***, 1ª ed, Chapman & Hall, Londres.

HARDENBERG, H., HASE, F., 1979, “An Empirical Formula for Computing the Pressure Rise Delay of a Fuel from its Cetane Number and from the Relevant Parameters of Direct-Injection Diesel Engines”. In: *SAE Technical Papers*, 790493, Fevereiro, EUA.

HEYWOOD, J.B., 1988, ***Internal Combustion Engines Fundamentals***. 1ª ed, McGraw-Hill, EUA.

I.E.A., 2014, ***Special Report: World Energy Investiment Outlook 2014***, França.

KAIPIO, J.P., SOMERSALO, E., 2004, ***Statistical and Computational Inverse Problems***, Applied Mathematical Sciences 160, Springer, EUA.

KAIPIO, J.P., FOX, C., 2011, "The Bayesian Framework for Inserve Problems in Heat Transfer". ***Heat Transfer Engineering***, v. 32, n. 9(Out.), pp. 718-753.

KALMAN, R.E., 1960, "A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems". ***ASME Journal of Basic Engineering***, v. 82, n. 1(Nov.), pp. 35-45.

KUMAR, S., CHAUHAN, M.K., VARUN, 2013, "Numerical Modelling of Compression Ignition Engine: a Review". ***Renewable and Sustainable Energy Reviews***, v. 19 (Março), pp. 517-530.

LATA, D.B., MISRA, A., 2011, "Analysis of Ignition Delay Period of a Dual Fuel Diesel Engine with Hydrogen and LPG as Secondary Fuels". ***International Journal of Hydrogen Energy***, v. 36, n. 5(Março), pp. 3746-3756.

LI, Y., JIA, M., LIU, Y., *et al.*, 2013, "Numerical Study on the Combustion and Emission Characteristics of a Methanol/Diesel Reactivity Controlled Compression Ignition (RCCI) Engine". ***Applied Energy***, v. 106(Junho), pp. 184-197.

MAN Diesel & Turbo, 2010, ***Manual MAN L16/24: Instruction Manual***, 1ª ed., Alemanha.

MAN Diesel & Turbo, 2010, ***Manual MAN L16/24: Project Guide***, 1ª ed., Alemanha.

M.M.E., **2014,** ***Balanço Energético Nacional - Ano Base: 2013***, Brasília.

MOHAN, V.R., HAWORTH, D.C., 2014, "Turbulence-Chemistry Interactions in a Heavy Duty Compression-Ignition Engine". ***Proceedings of the Combustions Institute***, v. 35, n. 3, pp. 3053-3060.

NESHAT, E., SARAY, R.H., 2014, "Development of a New Multi Zone Model for Prediction of HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) Engine Compression, Performance and Emission Characteristics". ***Energy***, v. 73(Agosto), pp. 325-339.

ORLANDE, H.R.B., DULIKRAVICH, G.S., COLAÇO, M.J., 2008, "Bayesian Estimation of the Thermal Conductivity Components of Orthotropic Solids". *V Congresso Nacional de Engenharia Mecânica*, Salvador, Bahia, Brasil, 18-22 Agosto.

PASQUALETTE, M.A., ANTUNES, J.J.M., VIEIRA, D.S.N., *et al.*, 2014, "Métodos Para a Determinação do Atraso de Ignição em um Motor Marítimo Diesel Operando com Óleo Diesel Marítimo". *VIII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica*, 0979, Uberlândia, Minas Gerais, Brasil, 10-15 Agosto.

PAYRI, F., OLMEDA, P., MARTÍN, J., *et al.*, 2011, "A Complete 0D Thermodynamic Predictive Model for Direct Injection Diesel Engines". ***Applied Energy***, v. 88, n. 12(Dez.), pp. 4632-4641.

PAYRI, R., OLIVER, J.M.G., BARDI, M., *et al.*, 2012, "Fuel Temperature Influence on Diesel Sprays in Inert and Reacting Conditions". ***Applied Thermal Engineering***, v. 35(Março), pp. 185-195.

PITT, M.K., SHEPHARD, N., 1999, "Filtering via Simulation: Auxilary Particle Filters". ***Journal of the American Statistical Association***, v. 94, n. 446(Fev.), pp. 590-599.

RAKAPOULOS, C.D., RAKOPOULOS, D.C., MAVROPOULOS, G.C., *et al.*, 2004, "Experimental and Theoretical Study of the Short Term Response Temperature Transients in the Cylinder Wall of a Diesel Engine at Various Operating Conditions". ***Applied Thermal Engineering***, v. 24, n. 5-6(Abril), pp. 679-702.

RAKOPOULOS, C.D., KOSMADAKIS, G.M., DIMARATOS, A.M., *et al.*, 2011, "Investigating the Effect of Crevice Flow on Internal Combustion Engines Using a New Simple Crevice Model Implemented in a CFD Code". ***Applied Energy***, v. 88, n. 1(Jan.), pp. 111-126.

RAMOS, J.A., 1989, ***Internal Combustion Engine Modeling***. 1ª ed, Hemisphere Publishing Corporation, EUA.

RISTIC, B., ARULAMPALAM, S., GORDON, N., 2004, ***Beyond the Kalman Filter: Particle Filters for Tracking Applications***. Artech House Radar Library, Boston, EUA.

RAO, V., HONNERY, D., 2013, "A Comparison of Two NO_x Prediction Schemes for Use in Diesel Engine Thermodynamic Modelling". ***Fuel***, v. 107(Maio), pp. 662-670.

ROTHAMER, D.A., MURPHY, L., 2013, "Systematic Study of Ignition Delay for Jet Fuels and Diesel Fuel in a Heavy-Duty Diesel Engine". ***Proceedings of the Combustion Institute***, v. 34, n. 2(Agosto), pp. 3021-3029.

SAHIN, Z., DURGUN, O., 2008, "Multi-Zone Combustion Modeling for the Prediction of Diesel Engine Cycles and Engine Performance Parameters". ***Applied Thermal Engineering***, v. 28, n. 17-18(Dez.), pp. 2245-2256.

SAVVA, N.S., HOUNTALAS, D.T., 2014, "Evolution and Application of a Pseudo-Multi-Zone Model for the Prediction of NO_x Emissions from Large-Scale Diesel Engines at Various Operating Conditions". ***Energy Conversion and Management***, v. 85(Set.), pp. 373-388.

SCAPPIN, F., STEFANSSON, S.H., HAGLIND, F., *et al.*, 2012, "Validation of a Zero-Dimensional Model for Predicting of NO_x and Engine Performance for Electronically Controlled Marine Two-Stroke Diesel Engines". ***Applied Thermal Engineering***, v. 37(Maio), pp. 344-352.

SILVA, W.B., ORLANDE, H.R.B., COLAÇO, M.J., 2010, "Evaluation of Bayesian Filters Applied to Heat Conduction Problems*". 2nd International Conference in Engineering Optimization*, Lisboa, Portugal, 6-9 Setembro.

SILVA, W.B., ORLANDE, H.R.B., COLAÇO, M.J., *et al.*, 2011, "Application of Bayesian Filters to a One-dimensional Solidification Problem". *21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, Natal, Rio Grande do Norte, Brasil, 24-28 Outubro.

WIEBE, I.I., 1956, "Semi-Empirical Expression for Combustion Rates in Engines". In: *Proceedings of the Conference on Piston Engines*", pp. 185-191, Moscou, URSS.

WOSCHNI, G., 1967, "A Universally Aplicable Equation for Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine", In: *SAE Technical Papers*, 670931, Fevereiro, EUA.

YASAR, H., SOYHAN, H.S., WALMSLEY, H., *et al.*, 2008, "Double-Wiebe Function: an Approach for Single-Zone HCCI Engine Modeling". ***Applied Thermal Engineering***, v. 28, n. 11-12(Agosto), pp. 1284-1290.

YOUNG, M., LIENESCH, J., 1978, "An Engine Diagnostic Package (EDPAC) – Software for Analysing Cylinder Pressure-Time Data". In: *SAE Technical Papers*, 780967, Fevereiro, EUA.

ZERVAS, E., 2005, "Comparative Study of Some Experimental Methods to Characterize the Combustion Process in a SI Engine". ***Energy***, v. 30, n. 10(Julho), pp. 1803-1816.