



SIMULAÇÃO SOB INCERTEZAS DE MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

Marcus Vinicius Costa de Souza

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Rio de Janeiro

Junho de 2015

Souza, Marcus Vinicius Costa de

Simulação Sob Incertezas de Motores de Combustão Interna/ Marcus Vinicius Costa de Souza. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XV, 125 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Marcelo José Colaço

Albino José Kalab Leiroz

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Mecânica, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 94-101.

1. Simulação sob incerteza. 2. Quantificação de incerteza. 3. Motores de combustão interna. I. Colaço, Marcelo José *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

À minha esposa Carolina,
à minha filha Maria Eduarda,
à minha irmã Fernanda e
aos meus pais Luiz e Vânia.

Agradecimentos

Aos meus pais Vânia Maria Costa de Souza e Luiz Carlos Alves de Souza, que nunca mediram esforços para que eu pudesse estudar e por haverem transformado esta vida em uma existência digna, próspera e frutífera, preparando-me para conviver com o mundo.

À minha irmã Fernanda, pelo carinho e apoio.

À minha amada esposa Carolina Ferreira Lopes de Souza, por sua existência em minha vida, pelo que aprendo com seu convívio através de sua sabedoria e por seu companheirismo.

À minha querida filha Maria Eduarda Ferreira Lopes de Souza, que deu um novo significado para minha vida e preenche meus dias com alegria.

Ao Dr. Daisaku Ikeda por personificar o verdadeiro significado da vida.

Ao meu orientador Marcelo José Colaço e ao meu co-orientador Albino José Kalab Leiroz, que contribuíram para que a minha formação acadêmica caminhasse no sentido de superar as fronteiras dos saberes, pelas observações e orientações precisas ao longo da formulação deste trabalho.

Aos amigos que conquistei na COPPE/UFRJ, em especial aos amigos Ana Cláudia M. Pimentel, Camila Lacerda e Gabriel.

Aos professores e funcionários do Programa de Pós-Graduação da Engenharia Mecânica da COPPE, em especial aos funcionários do LMT e LTTC.

À CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), ao Programa de Recursos Humanos 37 (PRH-37) da ANP e à FAPERJ (Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro) pelo suporte financeiro.

A todos que contribuíram para que fosse possível a realização deste trabalho.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

SIMULAÇÃO SOB INCERTEZAS DE MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA

Marcus Vinicius Costa de Souza

Junho /2015

Orientadores: Marcelo José Colaço
Albino José Kalab Leiroz

Programa: Engenharia Mecânica

O presente trabalho tem por objetivo modelar o processo de combustão em um motor de combustão interna operando em ciclo Otto ou ciclo Diesel, quantificando a incerteza em diferentes variáveis. Como resultado, as curvas de pressão e temperatura são obtidas como função do ângulo do virabrequim para diferentes níveis de incerteza. Para esta finalidade, o Polinômio de Caos generalizado e o Método de Colocação Estocástica foram aplicados a um conjunto de equações diferenciais ordinárias, obtidas a partir de uma análise utilizando a Primeira Lei da Termodinâmica (modelo zero-dimensional). São adotadas duas distribuições de probabilidade para realizar a solução estocástica: Uniforme e Gaussiana. O momento estocástico fornecido pela simulação de Monte Carlo é usado como referência para verificar os resultados. O Método de Colocação Estocástica mostrou-se mais eficiente em relação ao Polinômio de Caos generalizado. A fim de mostrar a viabilidade da metodologia proposta simulou-se o funcionamento de um motor marítimo operando no ciclo Diesel, tomando por resultado curvas máximas e mínimas para a pressão com diferentes níveis de incerteza.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

SIMULATION UNDER UNCERTAINTY OF AN INTERNAL COMBUSTION ENGINE

Marcus Vinicius Costa de Souza

June /2015

Advisors: Marcelo José Colaço
Albino José Kalab Leiroz

Department: Mechanical Engineering

The present study aims to model the combustion process in an internal combustion engine operating in Otto or Diesel cycle, using the model based on the First Law of Thermodynamics, quantifying uncertainty in different variables. As a result, the pressure and temperature curves are obtained as a function of crank angle for different levels of uncertainty. For this purpose, the generalized Polynomial Chaos and the Stochastic Collocation method are applied to a set of ordinary differential equations, obtained from an analysis of the First Law of Thermodynamics of the problem being studied (zero-dimensional model). The solution methods of uncertainty quantification is provided by the stochastic moments. Two probability distributions were considered to perform the stochastic solution: Uniform and Gaussian. The stochastic moment provided by Monte Carlo simulation was used as reference to verify the results achieved. The Stochastic Collocation Method was more efficient compared to the generalized Polynomial Chaos. In order to show the feasibility of the methodology the operation of a marine engine operating on diesel cycle was simulated, by taking as result maximum and minimum values for the pressure curve at different levels of uncertainty.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	X
LISTA DE TABELAS.....	XI
NOMENCLATURA	XII
LISTA DE SIGLAS	XV
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Justificativa.....	2
1.2. Objetivos	3
1.3. Organização da tese	4
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	5
2.1. Biocombustíveis	5
2.2. Modelagem termodinâmica e simulação computacional.....	9
2.3. Técnicas para quantificação de incerteza.....	13
3. PROBLEMA FÍSICO E DESCRIÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO.....	20
3.1. Geometria do sistema	22
3.2. O processo de combustão.....	24
3.3. Transferência de calor.....	27
3.4. Análise termodinâmica	29
3.5. Reação química de combustão	32
4. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO.....	34
4.1. Solução determinística	34
4.2. Técnicas de Quantificação de Incertezas	35
4.2.1. Polinômio de Caos Generalizado (PCg).....	36
4.2.2. Método de Colocação Estocástica (MCE).....	40
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	50
5.1. Problema determinístico	52
5.2. Problema estocástico	53
5.2.1. Propagação de incertezas via PCg	55
5.2.2. Propagação de incertezas via MCE	69
6. APLICAÇÃO A UM CASO REAL	85
7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS	96
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	99
Apêndice A.....	108
A.1 Simulação de Monte Carlo	108
Apêndice B.....	110
B.1 Simulação sob incertezas do motor operando no ciclo otto por meio do PCg.....	110

Apêndice C	114
C.1 Simulação sob incertezas do motor operando no ciclo otto por meio do MCE....	114
APêndice D	120
D.1 Simulação sob incertezas do motor operando no ciclo diesel por meio do MCE	120

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1 Funcionamento de um motor de 4 tempos (a) com ignição por centelha e (b) de ignição por compressão	21
Figura 3.2 Esquema da geometria do cilindro, pistão, biela e virabrequim.	22
Figura 4.1 Fluxograma da aplicação do PCg ao modelo estocástico	40
Figura 4.2 Malha esparsa de Clenshaw-Curtis.....	47
Figura 4.3 Fluxograma da aplicação do MCE ao modelo estocástico	49
Figura 5.1 Comparação da pressão simulada com a experimental.....	52
Figura 5.2 Perfil de pressão e I.C. sob incerteza Gaussiana via MC.....	58
Figura 5.3 Perfil de temperatura e I.C. sob incerteza Gaussiana via MC	58
Figura 5.4 Perfil de pressão sob incerteza Uniforme via MC.....	59
Figura 5.5 Perfil de temperatura sob incerteza Uniforme via MC	60
Figura 5.6 Comparação entre PCg e MC para a pressão com distribuição Gaussiana	65
Figura 5.7 Comparação entre PCg e MC para a temperatura com distribuição Gaussiana	66
Figura 5.8 Comparação entre PCg e MC para a pressão com distribuição Uniforme.....	67
Figura 5.9 Comparação entre PCg e MC para a temperatura com distribuição Uniforme.....	67
Figura 5.10 Comparação entre PCg e MCE para o caso $h = 0$	70
Figura 5.11 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 1	74
Figura 5.12 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 2	75
Figura 5.13 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 3	76
Figura 5.14 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 4	77
Figura 5.15 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 5	78
Figura 5.16 Verificação do MCE para o Modelo 1	79
Figura 5.17 Verificação do MCE para o Modelo 2.....	80
Figura 5.18 Verificação do MCE para o Modelo 3.....	81
Figura 5.19 Verificação do MCE para o Modelo 4.....	82
Figura 5.20 Verificação do MCE para o Modelo 5.....	82
Figura 5.21 Comparação entre os Modelos estocásticos.....	83
Figura 6.1 Motor MAN com 25% de carga	90
Figura 6.2 Motor MAN com 50% de carga	91
Figura 6.3 Motor MAN com 75% de carga	92
Figura 6.4 Motor MAN com 100% de carga	93

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 Esquema de Askey (Xiu, 2010).....	37
Tabela 5.1 Dados técnicos do motor (Melo, 2007).....	50
Tabela 5.2 Dados de entrada obtidos experimentalmente (Melo, 2007)	51
Tabela 5.3 Parâmetros ajustáveis do modelo matemático (Melo, 2007)	51
Tabela 5.4 Propriedades do etanol (Melo, 2007)	51
Tabela 5.5 Desvio RMS entre a solução estocástica via MC (500.000) para a distribuição Gaussiana e a solução determinística	56
Tabela 5.6 Desvio RMS entre a solução estocástica via MC (500.000) para a distribuição Uniforme e a solução determinística.....	57
Tabela 5.7 Convergência da solução estocástica via MC para distribuição Gaussiana.....	61
Tabela 5.8 Convergência da solução estocástica via MC para distribuição Uniforme	62
Tabela 5.9 Polinômio mônico de Hermite e Legendre.....	62
Tabela 5.10 Desvio RMS entre as soluções estocásticas via MC e PCg para a distribuição Gaussiana	63
Tabela 5.11 Desvio RMS entre as soluções estocásticas via MC e PCg para a distribuição Uniforme.....	64
Tabela 5.12 Tempo computacional (s) do PCg para a distribuição Gaussiana.....	68
Tabela 5.13 Tempo computacional (min) do MC para a distribuição Gaussiana	68
Tabela 5.14 Tempo computacional (s) do PCg para a distribuição Uniforme	69
Tabela 5.15 Tempo computacional (min) do MC para a distribuição Uniforme.....	69
Tabela 5.16 Diferença relativa entre MCE e PCg para o caso $h=0$	71
Tabela 5.17 Tempo computacional do MCE e do PCg para o caso $h=0$	71
Tabela 5.18 Desvio-padrão (σ) das variáveis estocásticas	73
Tabela 5.19 Quantidade de pontos de colocação por nível.....	74
Tabela 5.20 Tempo computacional (min) do MCE	84
Tabela 6.1 Dados técnicos do MAN-Innovator 4C (MAN Diesel & Turbo, 2010)	86
Tabela 6.2 Dados operacionais do MAN-Innovator 4C (Bueno, 2011)	86
Tabela 6.3 Diferença relativa entre o valor máximo da pressão experimental e o Intervalo de Incerteza.....	94

NOMENCLATURA

A	área superficial [mm^2]
\mathcal{A}	produto tensorial
a_w	coeficiente da Equação de Wiebe
AC	razão ar-combustível estequiométrica
\bar{c}_v	calor específico a volume constante [J (molK)^{-1}]
c_j^i	funcional linear
D	diâmetro do cilindro [mm]
E	valor esperado
f_{cor}	constante que ajusta o termo de troca de calor pela parede do cilindro
h	coeficiente combinado de transferência de calor [$\text{W (m}^2\text{K)}^{-1}$]
h_a	coeficiente de transferência de calor por convecção [$\text{W (m}^2\text{K)}^{-1}$]
h_r	coeficiente de transferência de calor por radiação [$\text{W (m}^2\text{K)}^{-1}$]
l	comprimento da biela [mm]
ℓ	polinômio de Lagrange
m_a	massa do ar [kg]
m_c	massa de combustível [kg]
m_w	coeficiente da Equação de Wiebe
m_m	massa da mistura [kg]
n	dimensão
N	rotação do motor [rad s^{-1}]
n_p	maior grau do polinômio ortogonal
n_{cil}	quantidade de cilindros
P	pressão [MPa]
PCI	poder calorífico inferior do combustível [MJ kg^{-1}]
P_0	pressão sem ocorrência de combustão [MPa]
Q_a	energia aparente [J]
Q_c	liberação de energia para o sistema em função do ângulo do virabrequim [J]
Q_p	transferência de calor a partir do sistema [J]
Q_{total}	energia instantânea liberada durante a combustão [J]
r	raio do virabrequim [mm]
R	constante dos gases [J (gK)^{-1}]
\bar{R}	constante universal dos gases [J (molK)^{-1}]

r	razão de compressão
S_{ξ}	suporte da variável aleatória
S	distância entre o pino munhão e o virabrequim [mm]
t	abcissas
T	temperatura [°C]
T_p	temperatura na parede [°C]
T_{∞}	temperatura do ambiente [°C]
U	energia interna [J]
\mathcal{U}	fórmula de quadratura
V	volume instantâneo da câmara de combustão [mm ³]
V_{ar}	vazão de ar [kg h ⁻¹]
V_{comb}	vazão de combustível [kg h ⁻¹]
V_d	cilindrada [cm ³]
X_e	fração mássica de combustível queimado estocástica
\mathcal{X}	conjunto de abcissas
x	fração mássica de combustível queimado
w	função de densidade de probabilidade
W	trabalho realizado pelo pistão [J]

Símbolos Gregos

γ	razão entre calores específicos
θ	ângulo do virabrequim [graus]
θ_0	ângulo de início da combustão [graus]
θ_{AVP}	ângulo de abertura da válvula de descarga [graus]
θ_{FVA}	ângulo de fechamento da válvula de admissão [graus]
ε_w	emissividade da parede do cilindro
ε_g	emissividade do gás
ξ	variável aleatória
λ	coeficiente de excesso de ar
σ	desvio padrão
ϕ	razão de equivalência
ψ	polinômio ortogonal
v_p	velocidade média do pistão [m s ⁻¹]

v_g	velocidade da mistura gasosa [m s^{-1}]
η_c	eficiência da combustão
$\Delta\theta$	duração da combustão [graus]

LISTA DE SIGLAS

FDP	Função de densidade de probabilidade
MC	Monte Carlo
MCE	Método de Colocação Estocástica
PCg	Polinômio de Caos generalizado
PMI	Ponto morto inferior
PMS	Ponto morto superior
RMS	Root mean square
VW	Volkswagen
I.C.	Intervalo de Confiança
I.I.	Intervalo de Incerteza

1. INTRODUÇÃO

A computação científica é capaz de tornar menos dispendiosa a pesquisa de motores operando segundo o ciclo Otto ou Diesel, devido ao poder de processamento dos computadores atuais. Conseqüentemente, existe a necessidade de ampliar os conhecimentos acerca da modelagem dos complexos fenômenos físicos que ocorrem durante o funcionamento de um motor de combustão interna.

A precisão da solução de problemas físicos por meio de modelos matemáticos requer uma completa compreensão de todos os fenômenos básicos envolvidos e suas descrições detalhadas, em geral, em termos de equações diferenciais parciais ou ordinárias. Tais modelos são formulados em função de propriedades físicas ou constantes que tipicamente contém algum grau de incerteza. Nesse cenário, um campo de pesquisa relativamente novo chamado quantificação e propagação de incerteza surge a fim de investigar a influência das incertezas por meio da simulação computacional de um fenômeno físico. Tal área de estudo tem se ampliado e desenvolvido nos últimos anos, devido à necessidade de se obter simulações numéricas com dados pouco precisos.

A solução das equações estocásticas ordinárias ou parciais podem ser obtidas por métodos estatísticos ou não-estatísticos e ambas as técnicas serão empregadas nesse trabalho. O método Polinômio de Caos generalizado (PCg) (não-estatístico) e o Método de Colocação Estocástica (MCE) (estatístico) serão aplicados a um problema de combustão modelado por meio de uma análise da Primeira Lei da Termodinâmica, e os resultados serão comparados com os resultados fornecidos pela simulação de Monte Carlo (MC). Este último é um método amostral clássico onde a precisão da solução depende do tamanho da amostra e, conseqüentemente, o custo computacional torna-se elevado.

O Polinômio de Caos generalizado é um método relativamente recente e consiste em uma generalização da teoria do Polinômio de Caos de Hermite proposto por Wiener em 1932. Essa é uma metodologia que utiliza a expansão em Polinômios de Caos juntamente com o método de Galerkin e sua aplicação resulta em um sistema distinto do modelo estocástico original. A técnica PCg, em essência, representa a solução estocástica como uma expansão espectral dos polinômios ortogonais em um espaço aleatório (Xiu, 2009). Mais ainda, a resolução do sistema de equações estocásticas depende da escolha do polinômio ortogonal que, por sua vez, depende da distribuição aleatória das incertezas que são consideradas. Os polinômios ortogonais possuem uma importante classe chamada Esquema de Askey, que associa

o polinômio ortogonal hipergeométrico com uma equação de diferenças ou diferencial parcial/ordinária (Xiu e Karniadakis, 2002).

O Método de Colocação Estocástica foi desenvolvido por Mathelin e Hussaini em 2003, cujo objetivo foi reduzir o custo do Polinômio de Caos. Essa técnica de quantificação de incertezas é não-intrusiva e se baseia na interpolação das variáveis de interesse em um conjunto de pontos previamente estabelecidos (Loeven et al., 2006). Vale destacar que por ser um método não-intrusivo, torna-se possível usar o código computacional elaborado para solucionar numericamente a versão determinística do problema.

As pesquisas acerca da modelagem do ciclo termodinâmico de motores, tanto de ignição por centelha ou compressão, em linhas gerais, tem por objetivo analisar a conversão da energia química do combustível em energia mecânica, dimensões dos componentes do motor, trocas térmicas entre os componentes, etc (Rakopoulos, 1992). No entanto, para que a simulação computacional seja suficientemente próxima do fenômeno físico, os modelos se tornam cada vez mais complexos.

Diante desse cenário, a presente pesquisa visa expandir os conhecimentos acerca da propagação de incerteza na simulação de motores de combustão interna, tanto em ciclo Otto quanto em ciclo Diesel, por meio das técnicas Polinômio de Caos generalizado e de Colocação Estocástica. Tais métodos de quantificação de incertezas determinam os momentos estocásticos (média e variância) das grandezas termodinâmicas de interesse, os quais permitem, por exemplo, determinar valores máximos e mínimos para a pressão dos gases na câmara de combustão. Dessa forma, para mostrar a aplicabilidade da metodologia de trabalho, será usada a curva experimental da pressão no interior do cilindro de um motor diesel marítimo.

1.1. Justificativa

A incerteza caracteriza-se pela insuficiência do modelo matemático de representar um fenômeno físico devido ao desconhecimento ou conhecimento limitado acerca de alguns dos eventos físicos e também pela simplificação inerente aos sub-modelos (Alvin et al., 1998).

A complexidade física do funcionamento de um motor de combustão interna envolve escoamento turbulento, multifásicos e reativos, cinética química não-linear, efeitos de compressibilidade (mudanças volumétricas devido a variações na pressão), efeitos da inércia variável (alteração do volume em função da composição variável do fluido de trabalho ou adição de calor), a interação entre o fluido e a parede do cilindro, a troca de calor pelas fronteiras da câmara de combustão com volume variável, a

queima do combustível é diferente a cada ciclo, entre outros (Heywood, 1988). Assim, um modelo matemático do funcionamento de em um motor de combustão interna, mesmo que elaborado com extremo rigor, encontra-se sujeito à incertezas inerentes ao processo de modelagem.

Neste contexto, surge a necessidade de se expandir os conhecimentos da modelagem termodinâmica estocástica de motores e, por conseguinte, a solução numérica agregada às incertezas. Além disso, uma simulação computacional de um motor de combustão interna com propagação de incertezas pode auxiliar no projeto de motores, bem como reduzir os custos na pesquisa de combustíveis.

1.2. Objetivos

A presente pesquisa visa empregar técnicas de quantificação de incerteza a fim de solucionar numericamente um modelo termodinâmico zero-dimensional com incertezas, o qual representa o funcionamento de um motor de combustão interna operando no ciclo Otto ou Diesel.

Esta abordagem mostra-se inovadora por realizar a propagação de incertezas na simulação de um motor de combustão interna por meio do método de Polinômio de Caos generalizado (PCg) (versão intrusiva) e do Método de Colocação Estocástica (MCE) via interpolação de Lagrange com malha esparsa.

Realizar uma investigação bibliográfica a respeito da simulação sob incerteza por meio do Método de Colocação Estocástica e Polinômio de Caos generalizado, bem como proceder com uma revisão da literatura acerca da simulação de motores de combustão interna por abordagem termodinâmica. Mais ainda, compreender a evolução do biocombustível de uso automotivo, pois a simulação do motor Otto com propagação de incertezas adotará o etanol hidratado como combustível.

Esta tese tem os seguintes objetivos específicos:

- Propor uma metodologia a fim de simular sob incertezas o funcionamento de um motor de combustão interna operando no ciclo Otto, cuja formulação matemática empregue um modelo termodinâmico zero-dimensional.
- Simular o motor Otto com propagação de incertezas por meios das técnicas PCg e MCE, considerando a termodinâmica dos gases no interior do cilindro entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de escape, para dois casos: (i) câmara de combustão adiabática e incertezas seguindo uma distribuição de probabilidade Gaussiana ou Uniforme; (ii) transferência de calor por convecção pelas paredes do cilindro e incerteza com distribuição de probabilidade Uniforme;

- Simular o funcionamento de um motor diesel marítimo, incluindo incertezas com distribuição de probabilidade Uniforme no modelo matemático, por meio do MCE e empregar dados experimentais da pressão para verificar a aplicabilidade da metodologia proposta nessa tese;

1.3. Organização da tese

Além deste primeiro e introdutório capítulo, o qual reporta a relevância, justificativas e os objetivos que motivaram a elaboração do trabalho, o presente documento encontra-se estruturado em oito capítulos, dispostos de forma que as informações sejam apresentadas a fim de facilitar a compreensão do leitor.

Na sequência, uma revisão bibliográfica é apresentada no Capítulo 2, dissertando sobre o aspecto histórico dos biocombustíveis e sua importância ambiental, social e econômica. Mais ainda, descrevem-se alguns trabalhos que contribuíram para o processo de simulação computacional de motores de combustão interna por abordagem termodinâmica, bem como o estado da arte referente à quantificação de incerteza por meio do método do Polinômio de Caos generalizado e Método de Colocação Estocástica.

No Capítulo 3 são descritas as modelagens para a geometria do motor, o fenômeno de combustão (liberação de energia para o sistema e reação química) e dedução das equações de governo a partir da análise da Primeira Lei da Termodinâmica. Além disso, também são agregadas as hipóteses de trabalho para o problema em estudo.

Discussões acerca da metodologia empregada são expostas no Capítulo 4 e, para este fim, são expostos os problemas determinístico e estocástico com suas respectivas técnicas de quantificação de incertezas.

No Capítulo 5 averigua-se a validação do código computacional do problema determinístico por intermédio de resultados experimentais disponíveis na literatura. Em seguida, realiza-se a verificação tanto do código computacional do problema estocástico via Polinômio de Caos generalizado quanto do Método de Colocação Estocástica por meio do confronto dos resultados alcançados com aqueles provenientes do problema estocástico solucionado por simulação Monte Carlo.

Mostra-se que a metodologia proposta pode ser aplicada em um caso real no capítulo 6. O capítulo 7 traz as conclusões deste trabalho além das sugestões para trabalhos futuros. Por fim, apresentam-se as referências bibliográficas no capítulo 8.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A pesquisa bibliográfica foi conduzida no sentido de investigar minuciosamente, principalmente em problemas de engenharia, a simulação sob incertezas por meio do Método de Colocação Estocástica e Polinômio de Caos generalizado. Também foi levantado o Estado das artes acerca da simulação de motores de combustão interna por abordagem termodinâmica. Além disso, buscou-se estudar a evolução e os aspectos socioeconômicos associados ao biocombustível de uso automotivo, uma vez que o MCE e do PCg serão aplicados em modelos termodinâmicos zero-dimensionais estocásticos de um motor operando no ciclo Otto abastecido com etanol hidratado.

2.1. Biocombustíveis

Este tema engloba em si setores importantes que inevitavelmente se entrelaçam e que se mostram estratégicos para o futuro do Brasil no âmbito do meio ambiente, da economia, de aspectos sociais e tecnológicos, entre outros. Assim, para que a pesquisa do assunto em questão seja concebida com a devida importância que compete, torna-se fundamental considerar certos fatos históricos e econômicos.

Historicamente, o emprego de combustível de origem renovável encontra-se agregado ao surgimento dos motores de ciclo Diesel e Otto. Em 1860, o engenheiro Nikolaus Otto abasteceu um de seus motores com álcool e Henry Ford, em 1896, projetou seu primeiro automóvel alimentado exclusivamente por etanol. Em 1900, Rudolf Diesel utilizou óleo cru de amendoim (Taheripour *et al.*, 2010).

Ainda nesta época, início do século XX, o Brasil iniciou algumas pesquisas envolvendo etanol. Em 1903, no Estado do Rio de Janeiro, ocorreu a “Exposição Internacional de Produtos e Equipamentos a Álcool” e o “Congresso das Aplicações Industriais do Álcool”. Após 22 anos, em 1925, um carro abastecido por etanol percorreu os 430 km que separam Rio de Janeiro e São Paulo. Ainda neste ano, o engenheiro civil Ernesto Lopes da Fonseca Costa, da Escola Politécnica do Rio de Janeiro, organizou o congresso “O álcool como combustível industrial no Brasil” (Costa *et al.*, 2010).

Após 30 anos de esforço por parte da indústria sucroalcooleira de estabelecer o etanol como combustível, o governo brasileiro percebeu neste uma atraente opção energética. Em virtude dessa percepção, após as três primeiras décadas do séc. XX destacam-se alguns dos seguintes incentivos governamentais (Távora, 2011):

- Em 20 de fevereiro de 1931 foi estabelecido o decreto lei nº 19.717, que obrigou a mistura de 5% de etanol na gasolina importada;

- Em 1933 foi criado o Instituto do Açúcar e do Alcool (IAA), que organizou as bases para o aumento da produção alcooleira nacional por meio de financiamentos de destilarias anexas às usinas de açúcar;
- Em 23 de setembro de 1938 o decreto lei nº 737 estendeu a mistura de 5% de álcool à gasolina produzida no país, com a implantação da primeira refinaria nacional de petróleo;

Na década de 1940 em função da II Guerra Mundial ter dificultado a importação de petróleo e seus derivados, a mistura de etanol carburante à gasolina chegou a 42% (Costa *et al.*, 2010).

Em 1953 foi fundada a Petróleo Brasileiro S/A (Petrobras) e caberia à empresa estatal executar as atividades do setor petrolífero no Brasil em nome da União. Assim, a produção do etanol ficou em segundo plano. Contudo, em 1975, a produção do etanol volta a se destacar no cenário energético brasileiro devido à crise do petróleo de 1973 (Costa *et al.*, 2010).

A crise do petróleo de 1973 teve início com a Guerra do Yom Kippur, que foi um conflito entre uma coalizão de estados árabes contra Israel. Por isso, pela primeira vez o petróleo foi usado como instrumento político, por meio do embargo desse produto pelos países membros da OPEP (Organização dos Países Exportadores de Petróleo) e pela majoração dos preços do barril de petróleo de US\$ 3 para US\$ 12 em dezembro de 1973. A partir de então, houve um aumento vertiginoso no preço do barril de petróleo (Fares, 2007). O que expôs o erro estratégico do governo brasileiro em não possuir alternativo para o caso do petróleo se tornar escasso (Costa *et al.*, 2010).

Em face do colapso instalado, o Brasil precisou reduzir a dependência do petróleo e, assim, foi criado o Programa Nacional do Alcool (PROALCOOL) em 1975. Tal programa pode ser dividido em quatro períodos (Vieira e Ramos, 2006; Kohlhepp, 2010; Lopes, 2012):

- 1ª fase (1975-1978): a produção de etanol foi incentivada por meio da construção de destilarias anexas às usinas de açúcar a fim de que o mesmo fosse misturado à gasolina importada. Vale mencionar que no ano de 1975 o baixo preço do açúcar no mercado externo gerou ociosidade no parque sulcralcooleiro do Brasil e o PROALCOOL também visava resolver esta questão;
- 2ª fase (1979-1989): teve início com uma nova crise do petróleo (1979) devido a uma Revolução Fundamentalista Iraniana, a qual debilitou a produção petrolífera do Irã, que era um dos maiores produtores e, com isso, desequilibrou a relação oferta-procura no setor petrolífero mundial. O ápice do 2º choque do do Petróleo se deu na década de 1980. Nessa mesma

década o programa atingiu seu auge em relação ao investimento de recursos. Em 1989 ocorreu a crise do mercado brasileiro do etanol hidratado usado como combustível devido a crise do desabastecimento em função do aumento na exportação de açúcar, motivada pelo valor atrativo do mesmo no mercado internacional;

- 3ª fase (1990-1999): iniciou após a crise da falta de etanol nas bombas dos postos de combustível. Nesta década, o padrão do preço do petróleo no mercado internacional foi predominantemente baixo, o que elevou a demanda de gasolina e, conseqüentemente, ajudou o programa a se manter em função da adição de etanol anidro à gasolina. Outro fator relevante que também manteve o PROALCOOL deveu-se a manutenção da frota de carros movidos a etanol hidratado;
- 4ª fase (2000 em diante): ações corporativas, liberação de preços dos produtos setoriais, surgimento dos veículos *flex-fuel*, exportação de etanol com possibilidade de aumento e a elevação dos preços do petróleo no mercado mundial a curto e médio prazo, entre outros fatores, foram responsáveis pela renovação do programa. Com o controle do preço da gasolina de 2011 a 2014 foi reduzida a competitividade do etanol e, em 2015, o governo federal buscou auxiliar a indústria sucroalcooleira ao aumentar o teor de etanol anidro na gasolina de 25% para 27% (MME, 2015).

Por iniciativa do Instituto Nacional de Tecnologia do Brasil, na década de 1920 teve início o uso do biodiesel em território brasileiro. Porém, somente após a primeira crise do petróleo o Brasil iniciou as discussões acerca do uso de óleos vegetais como combustíveis, a fim de que os mesmos substituíssem o diesel (ou petrodiesel) (Andrade *et al.*, 2009). Neste contexto, em 1975, o Ministério da Agricultura coordenou a elaboração do Plano de Produção de Óleos Vegetais para Fins Energéticos (PROOLEO) (MME, 2008), que em 1980 passou a ser denominado de Programa Nacional de Óleos Vegetais para Fins Carburantes. O programa governamental do biodiesel previa uma regulamentação compulsória de mistura de 30% de óleo vegetal (ou derivado) ao óleo diesel, que a médio e longo prazo substituiria integralmente o óleo mineral (Suarez e Meneghetti, 2007). Alguns fatores contribuíram para que o PROOLEO saísse do centro das atenções por 30 anos, entre outros, o custo elevado para processar as oleaginosas e, conseqüentemente, produzir o biodiesel tornou-se dispendioso. Agregou-se a isso o sucesso do PROALCOOL que competia com o PROOLEO e, por este e outros motivos, sua expansão e consolidação foram impedidas (Távora, 2011).

De acordo com Goldenberg *et al.* (2004), os subsídios aplicados ao programa brasileiro Proálcool no passado permitiram a expansão do setor e a modernização das tecnologias de produção, tornando a produção economicamente competitiva com custos de produção relativamente baixos. Dessa maneira, o etanol brasileiro tornou-se completamente competitivo frente à gasolina no mercado internacional.

O uso de etanol em veículos leves pode ocorrer de forma pura, em mistura com a gasolina (nacional, de 18% a 27% de etanol anidro), ou ainda em misturas de qualquer porcentagem com a gasolina em carros bicompostíveis ou *flex fuel*. Os veículos com tecnologia *flex* foram lançados no Brasil em 2003. Em 2010, representavam 91% dos veículos leves novos comercializados no país (Jagadish *et al.*, 2011) e, em janeiro de 2015, correspondiam a 88,8% (ANFAVEA, 2015).

A tecnologia veicular à base de etanol evoluiu bastante e os automóveis flexíveis possuem emissões totais comparáveis ou até menores do que aqueles que utilizam a mistura de gasolina com até 25% de etanol anidro (Távora, 2011).

Por mais de três décadas (meados da década de 1970 até 2006), o Brasil foi o maior produtor e consumidor de etanol combustível do mundo. No ano de 2009, no entanto, os Estados Unidos da América aparecem em primeiro lugar com 41 bilhões de litros produzidos (REN 21, 2010). Cabe destacar que, quando se trata de etanol de cana-de-açúcar, o Brasil figura na 1ª posição. Na safra 2009/2010, a produção brasileira foi de 25,8 bilhões de litros (REN 21, 2010) e, na safra 2012/2013, a produção de etanol foi de 23,64 bilhões de litros (CONAB, 2013). Até abril de 2015, a produção de etanol consolidou-se em 28,66 bilhões de litros na safra 2014/2015 (CONAB, 2015).

O uso de veículos flex-fuel fez com que a demanda nacional de etanol crescesse cada vez mais. No mundo, diversos países vêm adotando mandatos de misturas de etanol, principalmente o E10 (10% de etanol misturado à gasolina) como ponto de partida para a introdução do produto em seus mercados (Jagadish *et al.*, 2011).

Por ser altamente eficiente e com baixo custo de produção, o etanol de cana é hoje uma das melhores opções para mitigar as emissões de gases de efeito estufa pela queima de combustíveis fósseis (An *et al.*, 2011).

O etanol produzido em outros países a partir de milho ou de trigo não atinge a grande eficiência do etanol de cana-de-açúcar, o que leva o etanol brasileiro a ser considerado um importante instrumento de mitigação de emissões (An *et al.*, 2011). Os principais efeitos do uso do etanol (puro ou em mistura com gasolina) nos centros urbanos foram: a eliminação dos compostos de chumbo na gasolina; a redução nas emissões de monóxido de carbono; a redução de enxofre e na mistura com gasolina; e emissões menos tóxicas e fotoquimicamente reativas de compostos orgânicos

(Komninos e Rakopoulos, 2012). Por outro lado, os movidos a etanol emitem compostos orgânicos, que são formados principalmente por etanol não-queimado (70%) e aldéidos (10%) (Saldiva et al., 2009). Os aldéidos são compostos por acetaldeídos e formaldeídos que são nocivos a saúde humana devido a característica carcinogênica do formaldeído, enquanto o formaldeído é também um provável carcinogênico (Zarante, 2007).

A utilização de etanol em motores com tecnologia Flex contribui positivamente para a melhoria da qualidade do ar nas grandes cidades, na medida em que reduz consideravelmente o nível de emissões prejudiciais advindas do uso de combustíveis fósseis.

2.2. Modelagem termodinâmica e simulação computacional

Perante as vantagens inerentes aos biocombustíveis, mostram-se crescentes as pesquisas que empregam simulação numérica a fim de prever o desempenho e as emissões de motores de combustão interna abastecidos com estes tipos de combustíveis. Tal aumento na aplicação da simulação computacional para fins de pesquisa também se deve aos avanços tecnológicos relativos ao poder de processamento dos computadores.

A simulação computacional de motores de combustão interna data da década de 50 do século XX (Vuuren *et al.*, 2002). A modelagem matemática dos processos em um motor pode ser categorizada em termodinâmica ou fluidodinâmica. A primeira agrupa os modelos zero-dimensional, fenomenológico e quasi-dimensional. Já a segunda é frequentemente chamada de multidimensional (Heywood, 1995).

A modelagem zero-dimensional se baseia na 1ª Lei da Termodinâmica e na equação de estado dos gases ideais, onde a formulação matemática proposta por cada autor difere conforme as hipóteses de trabalho e, por conseguinte, as equações auxiliares. A abordagem termodinâmica possui a vantagem de representar o fenômeno físico através de um sistema de equações diferenciais ordinárias que pode ser solucionado numericamente por técnicas bem estabelecidas, tal como o Método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

O escopo da revisão bibliográfica com relação à modelagem de motores de combustão interna se limitará aos modelos termodinâmicos do tipo zero-dimensional, uma vez que esta abordagem será adotada na presente pesquisa. Vale destacar que a referida abordagem é útil e comumente utilizada para prever os estados termodinâmicos (pressão e temperatura) na câmara de combustão, que por sua vez permite prever as características operacionais do motor (Payri *et al.*, 2011).

Os fenômenos físicos mais relevantes durante o funcionamento de um motor de combustão interna relacionam-se ao processo de combustão, isto é, a modelagem da liberação de energia e o combustível equivalente, dentre outros. Além disso, tão importante quanto a combustão é a troca de calor entre os gases da câmara de combustão e a superfície que a delimita, composta pelo pistão e as paredes do cilindro. Como o processo de queima do combustível é transiente, todos os fenômenos envolvidos ocorrem durante a revolução do eixo de manivelas e, por este motivo, a modelagem da geometria é imprescindível para a modelagem do motor.

A modelagem da troca de calor entre o fluido de trabalho e as superfícies da câmara de combustão é significativa para prever o trabalho realizado pelo pistão. Neste contexto, Borman e Nishiwaki (1987) realizaram um trabalho relevante, pois conduziram uma revisão acerca dos aspectos mais importantes na transferência de calor, com relação ao bom funcionamento de um motor de combustão interna. Também discutiram os principais modelos, em sua época, para as diferentes formas de troca de calor (condução, convecção e radiação) em um motor.

Alla (2002) pesquisou, por meio de simulação numérica, a influência da razão de equivalência, do ponto de ignição, taxa de liberação de calor e razão de compressão no desempenho de um motor de combustão interna com ignição por centelha. A modelagem matemática caracterizou a combustão pela taxa de liberação de calor, a eficiência da combustão em termos do excesso de ar e a troca de calor pela Lei de resfriamento de Newton. As equações de governo foram deduzidas a partir da Primeira Lei da Termodinâmica e da equação de estado para um gás ideal. Para analisar o desempenho do motor empregou-se a eficiência térmica indicada, a pressão média efetiva e a pressão média efetiva ao freio. Os resultados obtidos foram coerentes com os experimentais.

Ramadhas *et al.* (2006) investigaram o desempenho de um motor Diesel abastecido com biodiesel (semente de seringueira não-refinado) e sua mistura com Diesel (B20). Empregaram abordagem termodinâmica para modelar os processos físicos no interior do cilindro e as hipóteses de trabalho incluíram perda de calor pela parede da câmara de combustão, atraso de ignição, perdas por fricção e propriedades do gás em termos da temperatura. Para analisar o desempenho estudaram os efeitos da razão de compressão e da razão ar-combustível relativa sobre a eficiência térmica. Os resultados numéricos foram equiparados aos experimentais oriundos de um motor abastecido com Diesel (B100) e sua mistura com biodiesel (B20).

Rakopoulos *et al.* (2007) realizaram a simulação computacional de um ciclo fechado (válvulas fechadas) de um motor Diesel operando com óleo vegetal (semente de algodão) ou biodiesel derivado deste ou Diesel. Empregaram a Primeira Lei da

Termodinâmica e a equação de estado de um gás ideal para obter as equações de governo. O domínio físico foi modelado matematicamente em muti-zonas bidimensionais, a fim de considerar a injeção de combustível, desenvolvimento do spray e a evaporação das gotas. Utilizaram modelos específicos para cada zona. Contabilizaram o atraso de ignição e taxa de liberação de calor por meio de um modelo baseado na equação de Arrhenius. Agregaram a hipótese de troca de calor por convecção e radiação. Em relação aos gases resultantes da combustão, empregaram um modelo específico para a formação de óxido de nitrogênio, uma vez que a reação química foi considerada em equilíbrio. Alcançaram resultados que concordaram com dados experimentais, tanto em relação ao desempenho quanto as emissões, para os combustíveis empregados. Concluíram que as razões de equivalência combustível-ar no interior do spray do combustível foram limitadas quando o motor operou com biodiesel ou óleo vegetal.

Ganapathy *et al.* (2009) aplicaram o método de Taguchi (Antony e Antony, 2001) a um modelo zero-dimensional a fim de otimizar um motor abastecido com biodiesel de pinhão manso. Consideraram os processos de compressão, combustão e expansão no interior do cilindro. Agregaram a hipótese de gás ideal e combustão em duas zonas (pré-misturada e difusiva). A liberação de calor a partir da queima do combustível foi descrita pela equação de Wiebe dupla (Miyamoto *et al.*, 1985). O atraso de ignição foi calculado pela integração da relação de Wolfer (Bishop, 1965). Abordaram os processos de admissão e exaustão dos gases por volume de controle. Consideraram a perda de calor pela parede do cilindro por meio da equação de Hohenberg (Hohenberg, 1979) e taxa de liberação de calor conforme equação de Wiebe (Heywood, 1988). Como esperado, concluíram que a razão de compressão é o parâmetro mais relevante na otimização da eficiência térmica.

Khalilarya e Javadzadeh (2010) simularam um motor ciclo Otto abastecido com gasolina e gás natural comprimido (CNG – *Compressed Natural Gas*), cujos resultados foram validados experimentalmente. A modelagem ocorreu por abordagem baseada na formulação zero-dimensional, onde a velocidade da chama foi considerada turbulenta e a troca de calor nas paredes do cilindro, cabeça do pistão e cabeça do cilindro foi descrita por modelos distintos (dividiram a câmara de combustão em 3 zonas).

Colaço *et al.* (2010a) realizaram a simulação computacional do funcionamento de um motor operando em ciclo Diesel, abastecido com mistura de 3 a 100% de diesel com biodiesel (diesel de palma), onde 100% indica biodiesel puro. O modelo matemático foi obtido a partir da Primeira Lei da Termodinâmica com o intuito de prever o campo de pressão no interior do cilindro. Para tanto, consideraram a

mistura gasosa na câmara de combustão com comportamento ideal, o coeficiente de troca de calor foi representado pela equação de Eichelberg (Ramos, 1989), atraso de ignição modelado pela equação de Hardenberg e Hase (Hardenberg e Hase, 1979) e a taxa de liberação de calor proveniente da combustão foi descrita pela função de Wiebe dupla (Miyamoto *et al.*, 1985). Os calores específicos variaram com a temperatura e com a composição dos gases no interior da câmara de combustão. Os parâmetros que variam com a mistura foram identificados por um otimizador híbrido com uma superfície de resposta e medidas experimentais da pressão. Nas simulações numéricas variaram o tempo de injeção de combustível para cada mistura de combustível e carga, a fim de maximizar a pressão máxima no ciclo. Empregaram diferentes rotações (1500, 2000 e 2500 rpm), torques (20 a 30 Nm) e combustíveis (3%, 20%, 50% e 100% de biodiesel por volume diesel). A pesquisa mostrou a viabilidade de otimizar o ângulo de injeção a fim de maximizar a potência do motor em cada condição operacional investigada.

Ainda em 2010, Colaço *et al.* (2010b) empregaram a investigação descrita na alínea anterior a fim de estudar o comportamento do campo de temperatura no pistão. Tal pesquisa visou avaliar a influência do uso de diferentes combustíveis (biodiesel e misturas de diesel) no perfil térmico do cilindro. As equações de governo termodinâmicas, por meio da simulação numérica forneceram o campo de pressão, que foi usado para encontrar o histórico da temperatura no interior do cilindro, de forma que a temperatura foi usada como condição de contorno na superfície do cilindro em contato com a mistura gasosa presente na câmara de combustão. A refrigeração do pistão ocorreu pela superfície lateral por meio de um líquido refrigerante e pela superfície inferior por uso de óleo. A investigação foi conduzida para o pistão feito com dois materiais distintos: alumínio e aço. O primeiro atingiu o regime permanente em menos tempo que o pistão de aço. Além disso, foram notadas oscilações térmicas nas regiões distantes da câmara de combustão, sendo estas mais pronunciadas para o pistão de alumínio em função de sua condutividade térmica ser mais elevada que a do aço. Também compararam o transiente e o tempo necessário para atingir o regime permanente para diferentes torques e velocidades e notaram que não houve influência dos combustíveis usados.

Jagadish *et al.* (2011) simularam numericamente um cilindro de um motor de ignição por compressão, com injeção direta, abastecido com biodiesel, recirculação dos gases de exaustão e superalimentação. Modelaram fenomenologicamente as emissões de particulados e óxidos de nitrogênio, consideraram perda de calor, atraso de ignição e perdas por atrito. As curvas de temperatura e pressão simuladas foram comparadas aos resultados experimentais, que empregaram mistura de biodiesel

(éster metil de estearina de palma) com diesel (B10, B20 e B100) e etanol misturado com diesel (E10B, E20B e E30B).

2.3. Técnicas para quantificação de incerteza

A solução estocástica de um sistema de equações diferenciais ordinárias/parciais pode ser obtida por métodos estatísticos ou não-estatísticos. Exemplos de métodos estatísticos são a simulação de Monte Carlo e a amostragem estratificada.

A simulação por Monte Carlo é um método cuja metodologia consiste em resolver as equações do sistema para cada amostra dos parâmetros com incerteza. Apesar da taxa de convergência deste método ser independente da quantidade de variáveis com incerteza presentes, o mesmo apresenta um grande custo computacional, uma vez que se torna necessário um expressivo número de realizações para atingir a convergência desejada (Xiu e Karniadakis, 2004). Dessa forma, a acurácia deste tipo de método depende do tamanho da amostra conforme a Lei dos Grandes Números (Xiu e Karniadakis, 2004). Esta Lei estabelece que a estimativa de uma variável aproxima-se do valor verdadeiro conforme se aumenta o número de simulações e, conseqüentemente, ocasiona um custo computacional indesejavelmente alto.

Entre as técnicas não-estatísticas disponíveis na literatura, a mais aplicada é o método de Perturbação (Xiu e Karniadakis, 2004). Porém, este método tem por restrição não solucionar problemas com muitas incertezas. Neste contexto, surge uma técnica não-estatística recente e que tem sido empregada em diversas áreas de pesquisa, que é o Polinômio de Caos generalizado, também conhecida como Expansão em Polinômio de Caos por abordagem intrusiva. Tal método é uma generalização da teoria do Polinômio de Caos de Hermite proposto por Wiener em 1938 e que consiste em transformar o modelo estocástico em um modelo determinístico com dimensão maior (Wiener, 1938).

A abordagem por PCg para simular sistemas não-lineares contendo incertezas tornou-se popular nas últimas décadas, principalmente em virtude das pesquisas realizadas por Ghanem e Spanos desde 1990. Eles foram os pioneiros ao introduzir a técnica de Polinômio de Caos generalizado à engenharia.

Em 1991, Ghanem e Spanos (Ghanem e Spanos, 1991) resolveram problemas mecânicos estruturais envolvendo variabilidade material que foram modelados como processos estocásticos usando a expansão de Karhunen-Loève. Eles também aplicaram a metodologia de Galerkin estocástica para resolver um problema de

vibração não-linear com incertezas (Ghanem e Spanos, 1993). Aplicando a mesma metodologia, investigaram o problema de um meio com duas camadas separadas por uma interface flutuando aleatoriamente no espaço (Ghanem e Brzkala, 1996).

Em 1998, Ghanem e Dham (Ghanem e Dham, 1998) estudaram um modelo multifásico bidimensional que simulou o movimento de um NAPL (“Non-Aqueous Phase Liquid” ou fase líquida não-aquosa) em aquíferos heterogêneos. Nesse problema, a permeabilidade do meio poroso foi modelada como um processo estocástico usando a expansão de Karhunen-Loève e o método de Elementos Finitos. Ainda, em 1998, Ghanem (Ghanem, 1998) modelou as propriedades hidráulicas de um meio poroso como um processo espacial aleatório, com o objetivo de investigar a mecânica e o fluxo de transporte em um meio poroso aleatório.

Em 1999, Ghanem e Spanos (Ghanem e Spanos, 1999) aplicaram uma formulação espectral do Método de Elementos Finitos Estocásticos a fim de resolver um problema de condução de calor em um meio aleatório.

Mais recentemente, o grupo de pesquisa de Xiu e Karniadakis tem aplicado o PCg a diversos problemas, incluindo a interação escoamento-estrutura (Xiu *et al.*, 2002), problemas de difusão em regime permanente (Xiu e Karniadakis, 2002) e condução de calor transiente (Xiu e Karniadakis, 2003). Esta técnica também foi empregada em várias áreas, por exemplo, em dinâmica dos fluídos, problemas hiperbólicos, deformação de materiais, convecção natural, análise Bayesiana para problemas inversos e problemas biológicos, entre outros (Xiu, 2009).

Xiu e Karniadakis (2002) desenvolveram um estudo numérico para quantificar a influência das incertezas do parâmetro da difusividade e do termo fonte na solução de um problema de difusão, com base na representação aproximada do modelo por meio de expansão via Polinômio de Caos. O problema foi considerado bidimensional em regime permanente, submetido às condições de contorno de Neumann e Dirichlet. O método iterativo de Gauss Seidel foi implementado na resolução do sistema de equações. Foi realizada uma avaliação qualitativa do método PCg por meio da comparação com a técnica de simulação de Monte Carlo. Os resultados apresentaram uma boa concordância entre a solução obtida pelo método PCg e os resultados provenientes da simulação do método Monte Carlo. Ainda, verificou-se que o método do Polinômio de Caos demonstrou um custo computacional significativamente menor em comparação com a abordagem por Monte Carlo. No entanto, o desempenho do método PCg depende da dimensionalidade do espaço aleatório, uma vez que aumentando-se a quantidade de variáveis incertas pode tornar inviável a aplicação do método.

Em sua pesquisa posterior, Xiu e Karniadakis (2003) propuseram um estudo de quantificação de incertezas em um problema de condução de calor transiente em um resfriamento de um chip. Para tanto, foram utilizadas séries de polinômios ortogonais (Polinômios de Caos generalizado) para tratar um processo estocástico. As simulações numéricas realizadas tinham o objetivo de verificar a validade do modelo, incluindo os efeitos das incertezas nos parâmetros referentes à condutividade e à capacidade térmica. Dessa forma, o problema foi tratado bidimensionalmente com as condições de temperatura e fluxo prescritos e isolamento térmico nas paredes. Foram simulados dois casos para a condição de contorno da parede superior do chip, sendo o primeiro temperatura nula e o segundo adiabático. A validade dos resultados obtidos pelo Método do Polinômio de Caos foi obtida por meio do confronto com os resultados obtidos pelo Método de Monte Carlo. Os resultados provenientes do método PCg convergiram com uma expansão de caos de terceira ordem. Além disso, a simulação de Monte Carlo com pelo menos 20.000 realizações apresentou resultados coerentes aos obtidos pelo método PCg.

Algumas pesquisas concentraram-se em investigar as incertezas e sua propagação em escoamentos laminares e incompressíveis por meio do método PCg. Xiu e Karniadakis (2006) aplicaram o método a um escoamento em um microcanal sujeito a condições de contorno randômicas nas paredes. Para tanto, o fenômeno físico foi modelado pelas equações de Navier-Stokes. A convergência do método foi verificada pela comparação com os resultados obtidos pela técnica de Monte Carlo, procedimento este adotado na maioria dos estudos envolvendo o método PCg.

Wan e Karniadakis (2006) continuaram esse esforço e avaliaram as incertezas em um escoamento dentro de um cilindro circular via Polinômio de Caos generalizado multi-elemento e pelo Polinômio de Caos generalizado. Consideraram um escoamento incompressível, bidimensional, em regime permanente, com incertezas na condição de contorno na entrada do canal, condição de Neumann na saída do canal e condição de contorno periódica na direção transversal ao fluxo. A formulação físico-matemática foi regida pelas equações de Navier-Stokes. Nas simulações foi atribuído um perfil para velocidade na entrada do canal, onde se avaliou os efeitos das incertezas inseridas, a priori na frequência da velocidade, e a seguir, na amplitude da mesma. Concluíram que o método de Polinômio de Caos generalizado multi-elemento melhora o método PCg, mas não é indicado para elevada dimensão estocástica, pois a quantidade de elementos aumenta rapidamente.

Outro estudo, realizado por Rocha *et al.* (2012) apresentou a aplicação do método de Galerkin Estocástico (Polinômio de Caos generalizado) em uma equação de transporte linear em uma dimensão com somente uma variável aleatória (espaço

randômico unidimensional). Nas simulações numéricas a variável de transporte foi considerada incerta com distribuição Gaussiana. Visando a comparação da solução do método de Galerkin Estocástico, foi aplicado o método de Monte Carlo ao problema. De posse dos resultados, verificou-se que o Método Galerkin Estocástico determinou eficientemente a solução do problema proposto.

Sepahvand e Marburg (2013) empregaram uma técnica de problema inverso baseada no método de Polinômio de Caos generalizado, a fim de identificar os parâmetros com incertezas na saída do sistema através da resolução de um problema inverso. O problema inverso consistiu em estimar os parâmetros elásticos de placas ortotrópicas a partir dos dados modais. Empregaram o modelo de Pearson (Pearson, 1963) para identificar as funções de densidade de probabilidade e, a partir disso, elaboraram uma base ortogonal aleatória para cada parâmetro incerto. Os resultados foram obtidos de forma satisfatória mostrando que o método PCg pode ser aplicado mesmo para grandes propagações de incertezas.

Em sua pesquisa mais recente, Ashraf *et al.* (2013) aplicaram o método do Polinômio de Caos generalizado em um modelo que representava o armazenamento de gás carbônico em um depósito subterrâneo em zonas marinhas rasas. Esta estratégia é utilizada para reduzir a concentração de CO₂ na atmosfera, contribuindo para diminuição do efeito estufa. Os parâmetros incertos englobaram a densidade das barreiras e o ângulo de assoreamento da região. Os contornos da região estudada foram simulados como condições de Dirichlet. Os resultados revelaram a eficiência do método PCg em relação à convergência comparado à aplicação da técnica de Monte Carlo, sendo o ângulo de assoreamento o parâmetro mais sensível do modelo.

Trcala (2014) realizou uma análise numérica estocástica da transferência de umidade em madeira durante o aquecimento da mesma, onde a incerteza foi considerada no coeficiente de difusão e a formulação matemática considerou regime transiente. A pesquisa teve por objetivo demonstrar que o método estocástico espectral baseado na expansão em polinômio de caos (Polinômio de Caos generalizado) pode ser mais eficiente que o método de Monte Carlo. Os resultados mostraram que a simulação numérica da secagem de madeira por convecção com propagação de incerteza, por meio do Polinômio de Caos generalizado, mostrou-se computacionalmente melhor que o método de Monte Carlo e que a média e o desvio padrão de ambos os métodos concordaram.

Souza *et al.* (2014) simularam computacionalmente o funcionamento de um motor de combustão interna de ignição por centelha com propagação de incertezas via Polinômio de Caos generalizado. O modelo estocástico unidimensional foi elaborado a partir de uma análise pela 1ª Lei da Termodinâmica juntamente com uma equação de

estado. Consideraram o fenômeno físico da combustão no interior do cilindro, admitido como uma câmara adiabática, entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de descarga. A incerteza foi incluída na equação de Wiebe, que representa a liberação de energia para o sistema oriunda da combustão. Analisaram a incerteza com distribuição uniforme e gaussiana para diferentes desvios. Os resultados da técnica de quantificação de incerteza não-amstral foram confrontados com aqueles provenientes da simulação de Monte Carlo e as curvas de pressão foram concordantes. Aplicaram a metodologia de trabalho que propuseram, onde tomaram por resultado os intervalos de incerteza, que forneceram valores máximos e mínimos a cada ângulo do eixo de manivelas, cujo interior contém o valor experimental da pressão. Por meio da aplicação, mostraram a viabilidade de uso da metodologia em uma situação real, onde um motor estaria sendo projetado.

O método de Polinômio de Caos generalizado tem por vantagem o baixo custo computacional em função de ser uma técnica não-estatística. Mas, por outro lado, o sistema de equações diferenciais parciais determinísticas obtido pode ser complexo e não-linear, sendo a solução numérica inviável. Por esse aspecto, o Método de Colocação Estocástica (MCE), que é um método de amostragem, não modifica o modelo estocástico e agrega baixo esforço computacional.

Nobile *et al.* (2007) analisaram o Método de Colocação estocástico com malha esparsa do tipo Smolyak, a fim de aproximar as quantidades estatísticas relacionadas à solução de equações diferenciais parciais com coeficientes randômicos. Tiveram como objetivo principal compreender em quais situações a malha esparsa associada ao Método de Colocação Estocástico mostra-se mais vantajosa que o método de Monte Carlo ou ao tensor completo. Concluíram que o emprego de malha esparsa foi mais eficiente quando os dados de entrada dependiam de uma quantidade moderada de variáveis randômicas, que possuíam o mesmo peso na solução. Por outro lado, a taxa de convergência deteriorou quando tentaram resolver o problema proposto com incerteza nos dados de entrada.

Ainda em 2007, Ganapathysubramanian e Zabarás aplicaram o Método de Colocação Estocástica Adaptativo associado à malha esparsa em problemas de convecção natural com incerteza e consideraram diferentes dimensões estocásticas. Vale frisar que a malha esparsa foi gerada com base na regra de Clenshaw-Curtis Smolyak. Os casos investigados empregaram tanto o Método de Colocação Estocástico adaptativo quanto o convencional, o método de Monte Carlo e o Polinômio de Caos generalizado. Os seguintes casos foram investigados: (1) condições de contorno com incerteza, (2) incerteza na rugosidade da superfície (topologia do

contorno), (3) uma extensão do segundo, onde foi adotado número de Rayleigh crítico para o fluido de trabalho e (4) convecção em meio poroso heterogêneo com incerteza.

Lin *et al.* (2010) abordaram computacionalmente a quantificação de incerteza em um fenômeno complexo, devido ao escoamento em composto randômico heterogêneo, considerando-o em 2 ou 3 dimensões, cuja arquitetura interna e a variabilidade espacial das propriedades possuíam incertezas. Propuseram duas distribuições para as incertezas: gaussiana e uniforme. Combinaram a Decomposição em Domínio Randômico com o Método de Colocação Probabilístico com malha esparsa. Analisaram, de forma sistemática, os efeitos de comprimentos de correlação da condutividade log-hidráulica sobre o conjunto média e desvio padrão da carga hidráulica. Também investigaram o impacto de diferentes distribuições probabilísticas utilizadas para quantificar as incertezas preditivas associadas às incertezas geométricas (distribuição espacial dos materiais constitutivos em um composto).

A quantificação de incerteza em engenharia de fratura mecânica foi pesquisada por Riahi *et al.* (2010), que investigaram o problema do crescimento de uma trinca de fratura com incertezas nas variáveis de entrada, onde a resposta mecânica correspondeu à vida da fadiga, a qual foi representada pelo número de ciclos de carga na falha. A simulação numérica objetivou analisar o efeito das incertezas na resposta mecânica por meio do cálculo dos momentos estatísticos e da função de densidade de probabilidade. A eficiência do Método de Colocação Estocástico foi aferida ao compará-lo com a simulação de Monte Carlo, onde a dimensão estocástica foi limitada a 4. Com a metodologia que propuseram foi possível obter a função de densidade de probabilidade do comprimento da trinca em qualquer instante de tempo da vida de serviço.

Deng *et al.* (2011) pesquisaram a quantificação de incerteza em aeroelasticidade, que é um ramo da ciência que surge da interação entre as forças aerodinâmicas, elásticas e inerciais. O sistema aeroelástico que propuseram modela um aerofólio oscilando em flexão e torção. As incertezas surgem devido a valores incertos dos parâmetros do sistema ou de perturbações na condição inicial. Consideraram três casos de dimensão estocástica com 1, 2 e 5 variáveis randômicas. Observaram que o Método de Colocação Estocástica pode ter um melhor desempenho quando associado a uma estratégia de dimensão adaptativa e de malha esparsa. Os resultados do MCE apresentaram coerência com as simulações de Monte Carlo

Segundo Kamrani *et al.* (2012), até 2012 quase nada de decisivo havia sido dito a respeito da aproximação da solução de Equações Diferenciais Parciais Estocásticas por meio do Método de Colocação Estocástico. Por abordagem exclusivamente

numérica, investigaram a aplicação do MCE na Equação de Burguer estocástica. Também solucionaram a mesma equação pelo método de Espectral de Fourier. Realizaram uma análise analítica da taxa de convergência de ambos os métodos e por meio de resultados numéricos mostraram a superioridade do Método de Colocação Estocástica.

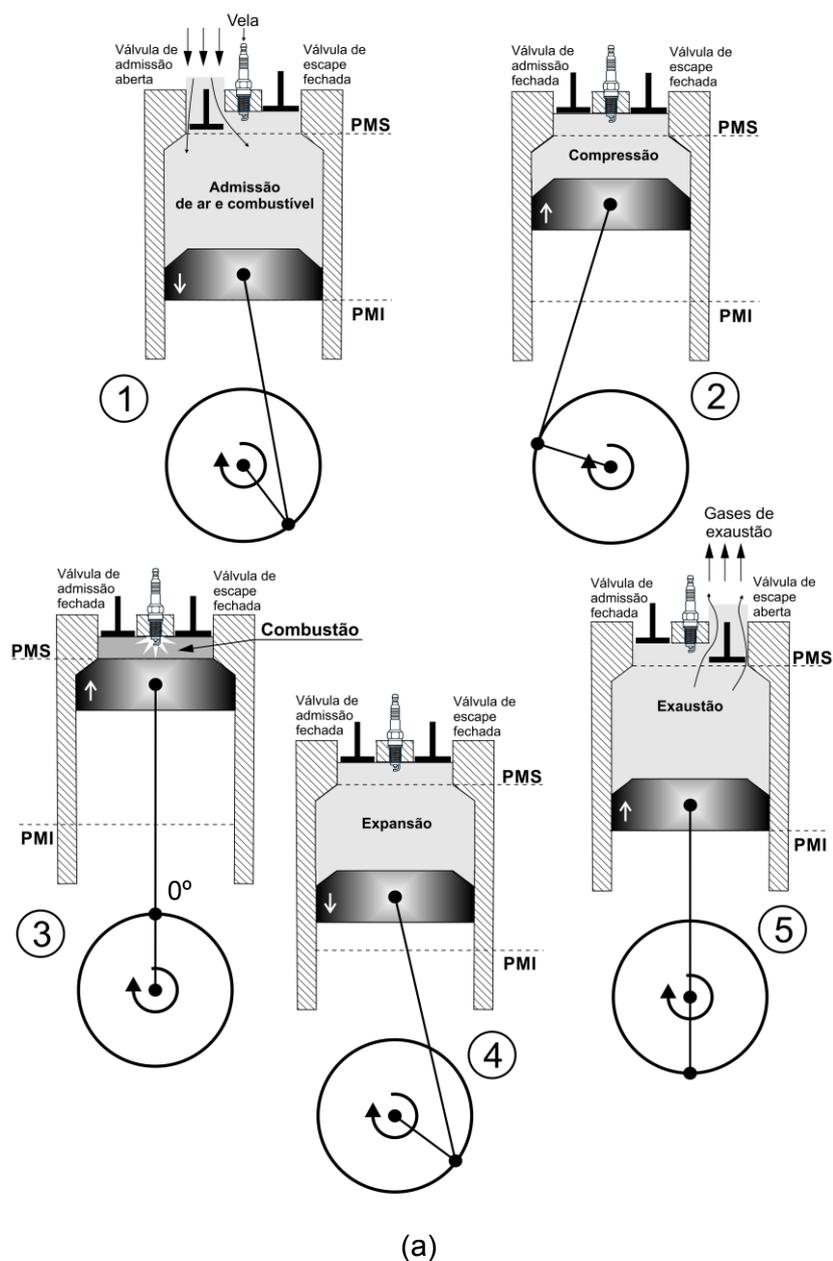
He *et al.* (2014) analisaram a confiabilidade de estruturas com cargas parâmetros incertos por meio do Método de Colocação Estocástica com malha esparsa. Nesse ramo do conhecimento, o problema fundamental consiste em determinar a probabilidade de falha, ou seja, conhecer a probabilidade da carga total exceder a resistência. Assim, o principal objetivo da pesquisa residiu em obter, de forma aproximada, a probabilidade de falha. A metodologia que propuseram foi aplicada em uma viga de aço sujeita a ação de um momento de flexão.

Perante a análise realizada da literatura disponível acerca da quantificação de incerteza por meio da técnica Polinômio de Caos generalizado e do Método de Colocação Estocástica, bem como sobre a modelagem termodinâmica de motores, verificou-se que os trabalhos referentes à simulação computacional de motores não quantificam as incertezas inerentes à modelagem do fenômeno físico que ocorre durante o funcionamento de um motor de combustão interna. Dessa forma, buscando uma modelagem de motores que considere incertezas nos parâmetros e/ou funções, a presente pesquisa contribui de forma inovadora ao considerar a incerteza no processo de combustão em uma simulação de motor de combustão interna. Para tanto, será empregado o método de expansão via Polinômio de Caos, em sua forma intrusiva, e também o Método de Colocação Estocástica com malha esparsa na propagação das incertezas, uma vez que estas técnicas apresentam-se versáteis em sua aplicabilidade e com bom desempenho, conforme verificado na literatura. Ainda, a metodologia proposta nesta pesquisa será aplicada à simulação de um motor operando em ciclo Otto e outro operando em ciclo Diesel, considerando incertezas nos parâmetros de um modelo zero-dimensional. Os resultados serão obtidos na forma de intervalos de incerteza (incerteza com distribuição Uniforme) e intervalos de confiança (incerteza com distribuição Gaussiana) e dados experimentais serão usados para validar os mesmos. Assim, em um caso real, onde um motor de combustão interna estaria sendo projetado, uma simulação sob incertezas permitiria obter curvas de pressão máximas e mínimas.

3. PROBLEMA FÍSICO E DESCRIÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO

O presente capítulo apresenta a descrição do problema físico e as hipóteses de trabalho. Além disso, expõe-se o modelo matemático e descreve-se a dedução do mesmo.

A Fig. 3.1 exibe o esquema de funcionamento de um motor de 4 tempos com combustão interna operando em ciclo Otto (a) e operando em ciclo Diesel (b). O ponto morto superior é indicado por PMS, o ponto morto inferior por PMI e o eixo de manivelas (virabrequim) gira no sentido horário.



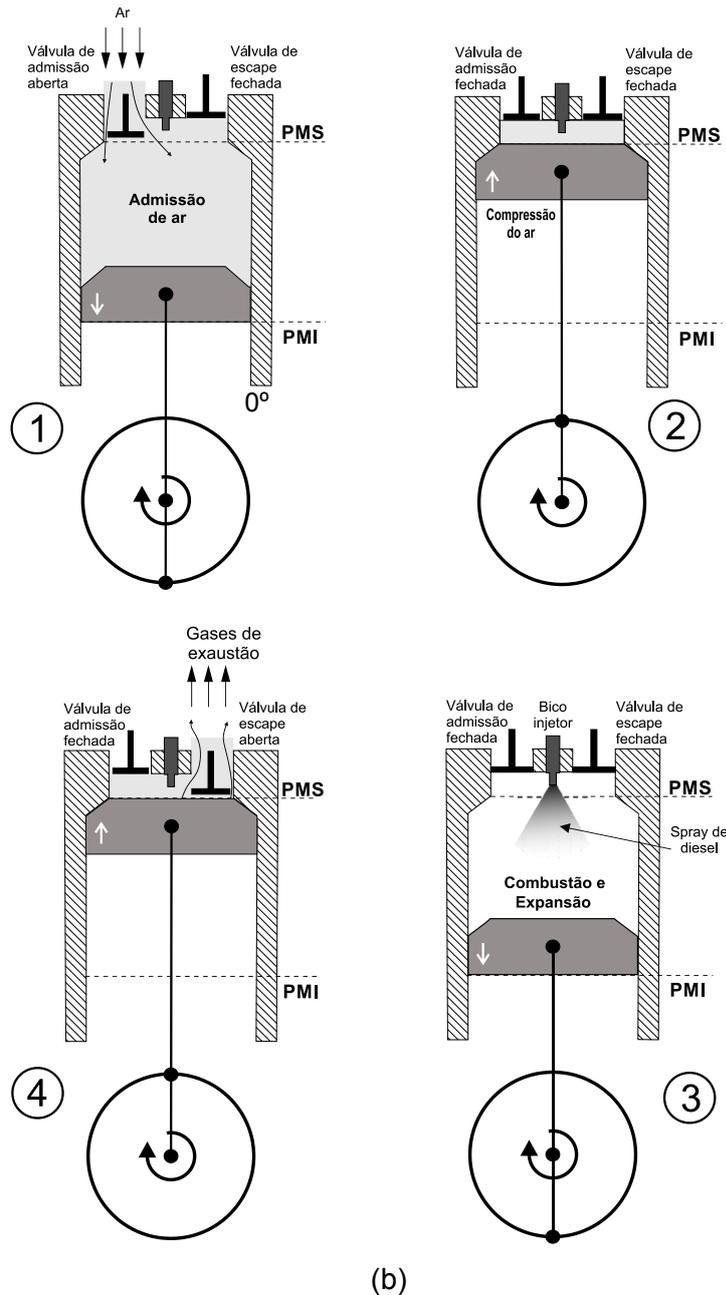


Figura 3.1 Funcionamento de um motor de 4 tempos (a) com ignição por centelha e (b) de ignição por compressão

O problema físico analisado nesta Tese ocorre entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de escape. Assim, a câmara de combustão encontra-se fechada e, conseqüentemente, não existe fluxo mássico de entrada e nem de saída. Enquanto as válvulas permanecem fechadas ocorrem os processos de compressão, combustão e expansão.

As seções a seguir dissertam acerca da modelagem do sistema em relação à geometria, caracterização da combustão, troca de calor pelas paredes do cilindro e dedução do equacionamento via análise termodinâmica.

3.1. Geometria do sistema

Parâmetros geométricos importantes como área superficial e volume variam de acordo com o ângulo do eixo de manivelas ou virabrequim. Assim, a modelagem da geometria deve considerar o ângulo θ como variável independente. Cabe ressaltar que o ângulo 0° corresponde ao ponto morto superior (PMS) e o virabrequim gira no sentido horário conforme ilustrado na Fig. 3.2, onde PMI corresponde ao ponto morto inferior, D ao diâmetro interno do cilindro, V_c ao volume morto (câmara de combustão), V_d ao volume deslocado e L ao curso do pistão.

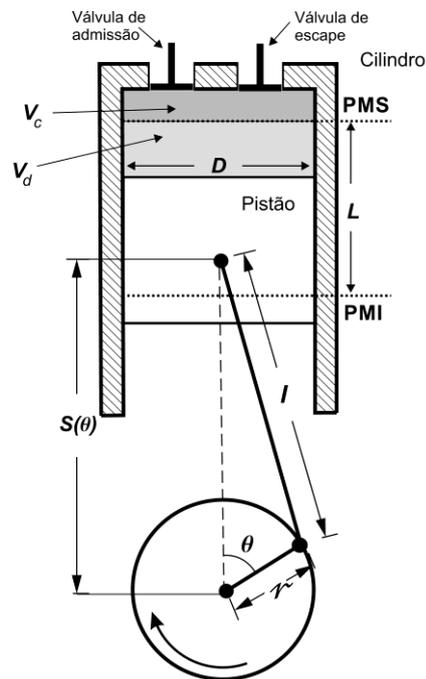


Figura 3.2 Esquema da geometria do cilindro, pistão, biela e virabrequim.

A distância S entre o pino munhão (elemento que serve de articulação entre a biela e o pistão) e o virabrequim é dado por,

$$S(\theta) = R \cos \theta + \sqrt{l^2 - r^2 \sin^2 \theta} \quad (3.1.1)$$

onde l é o comprimento da biela e r é o raio do virabrequim.

Ao considerar a soma das áreas do cabeçote com a coroa do pistão (A_1) e agregando a superfície lateral interna do cilindro entre a coroa do pistão e o cabeçote (A_2) tem-se a área superficial (A), que é dada por,

$$A(\theta) = A_1 + A_2(\theta) \quad (3.1.2)$$

Tomando por hipótese que a superfície do topo do pistão é plana e que a coroa do pistão e o cabeçote possuem áreas iguais tem-se que,

$$A_1 = 2 \cdot \frac{\pi D^2}{4} \quad (3.1.3)$$

A área A_2 agrega a área lateral do volume deslocado (A_{V_d}) e da câmara de combustão (A_{cc}) de forma que,

$$A_{V_d}(\theta) = \pi D(l + r - S(\theta)) \quad (3.1.4)$$

$$A_{cc} = \pi D \frac{2r}{r_c - 1} \quad (3.1.5)$$

onde $2r$ equivale à distância percorrida pelo pistão e r_c é dado por,

$$r_c = \frac{V_d + V_c}{V_c} \quad (3.1.6)$$

Assim a área superficial total para qualquer ângulo do virabrequim pode ser escrita como,

$$A(\theta) = \pi D \left[\frac{D}{2} + \frac{2r}{r_c - 1} + l - r - S(\theta) \right] \quad (3.1.7)$$

O volume do cilindro é dado pela soma do volume morto com o volume deslocado, com o seguinte equacionamento,

$$V(\theta) = \frac{\pi D^2}{4} \left[l + r + \frac{2r}{r_c - 1} - S(\theta) \right] \quad (3.1.8)$$

O volume deslocado pode ser obtido por meio da multiplicação do curso do pistão ($2r$) pela área da coroa do pistão.

3.2. O processo de combustão

Neste trabalho considera-se um motor de combustão interna de ignição por centelha (ciclo Otto) e de ignição por compressão (ciclo Diesel) e em cada tipo de operação a combustão ocorre de forma distinta.

O motor considerado nessa pesquisa e que opera em ciclo Otto, o combustível é misturado ao ar no sistema de entrada e conduzido para dentro do cilindro pela válvula de admissão. Em seguida, ocorre o processo de compressão da mistura e, ao término deste, por intermédio de uma descarga elétrica imposta pela vela inicia-se a reação de combustão (Heywood, 1980). O processo de queima pode ser dividido em três regiões, tomando-se por referência o ângulo do virabrequim, nesta ordem, (1) ignição e desenvolvimento da chama, (2) propagação da chama e (3) extinção da chama (Pulkrabek, 1997).

Diferentemente do ciclo Otto, a queima do combustível no ciclo Diesel deve-se a pulverização do diesel pelo bico injetor no interior da câmara de combustão, antes do pistão atingir o Ponto Morto Superior, que se inflama com o calor do ar comprimido (Heywood, 1980). Nesse tipo de motor a combustão pode ser compreendida em três etapas: (i) atraso da ignição, (ii) combustão pré-misturada e (iii) combustão difusiva. A etapa (i) compreende os ângulos do eixo de manivelas entre a injeção e o início da combustão; na etapa (ii), também denominada de combustão rápida, o spray composto de partículas de Diesel se espalha, evapora e se mistura ao ar com elevada temperatura ocasionando a combustão espontânea; a etapa (iii) é chamada também de combustão controlada, pois a mistura ar-combustível encontra-se com temperatura e pressão elevadas e a combustão ocorre pela mistura do ar com o diesel (Heywood, 1980).

No motor Otto a relação ar-combustível da mistura homogênea encontra-se dentro dos limites de ignição e no motor Diesel, as gotas de combustível já se encontram preparadas para autoignição, pois estas em atmosfera oxidante a alta temperatura e pressão (Mollenhauer e Tschoeke, 2010). Além disso, os motores a diesel necessitam de excesso de ar para a combustão normal, enquanto os motores de ignição por centelha empregam quantidade de ar próxima da estequiométrica (Mollenhauer e Tschoeke, 2010).

Independentemente do tipo de ciclo, o processo de combustão pode ser caracterizado pelo consumo da fração mássica do combustível (fração de energia liberada) ao percorrer os ângulos do virabrequim (Heywood, 1988). A seguir são apresentadas algumas metodologias típicas de modelagem da fração de massa queimada, que consideram taxas definidas de queima.

A fração mássica de combustível queimado durante a combustão ($x(\theta)$) pode ser modelada pela fórmula do cosseno (Sezer e Bilgin, 2012),

$$x(\theta) = \begin{cases} 0 & , \quad \theta < \theta_0 \\ 0,5 \left[1 - \cos\left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta}\right) \right] & , \quad \theta_0 \leq \theta \leq \theta_0 + \Delta\theta \\ 1 & , \quad \theta > \theta_0 + \Delta\theta \end{cases} \quad (3.2.1)$$

onde $\Delta\theta$ é a duração da combustão e θ_0 é o ângulo em que a combustão inicia, ou seja, posição do eixo de manivelas em que ocorre o início da liberação de energia para o sistema.

A Eq. (3.2.2) representa o fenômeno de liberação de energia para o sistema por meio da combustão, mas permite maior flexibilidade de ajuste por meio da constante m_w conforme segue abaixo (Alla, 2002),

$$x(\theta) = \begin{cases} 0 & , \quad \theta < \theta_0 \\ 1 - \exp\left[-\left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta}\right)^{m_w}\right] & , \quad \theta_0 \leq \theta \leq \theta_0 + \Delta\theta \\ 1 & , \quad \theta > \theta_0 + \Delta\theta \end{cases} \quad (3.2.2)$$

Outro modelo foi proposto por Ivan Ivanovitch Wiebe em 1960 (Heywood, 1988) e que tem por base a teoria da cinética das reações químicas e reações em cadeia (Ghojel, 2010). Assim, esta equação ficou denominada de função de Wiebe (Heywood, 1980) conforme Eq. (3.2.3),

$$x(\theta) = \begin{cases} 0 & , \quad \theta < \theta_0 \\ 1 - \exp\left[-a_w \left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta}\right)^{m_w+1}\right] & , \quad \theta_0 \leq \theta \leq \theta_0 + \Delta\theta \\ 1 & , \quad \theta > \theta_0 + \Delta\theta \end{cases} \quad (3.2.3)$$

onde a_w e m_w são parâmetros ajustáveis que definem a forma da curva. Vale destacar que a Eq. (3.2.3) é empírica e seus valores variam de 0 a 1, pois consideram a queima completa do combustível.

A eficiência da combustão (η_c) corrige o valor da fração de combustível queimada ideal. Como o tempo hábil para a queima do combustível em um ciclo do motor é muito curto, nem todas as moléculas do combustível encontram uma molécula de oxigênio ou a temperatura local pode não ser propícia para a reação química (Pulkrabek, 1997).

A Eq. (3.2.4) descreve a eficiência da combustão, para um motor operando em ciclo Otto, em termos da razão entre a relação ar-combustível real e a estequiométrica (λ) (Alla, 2002),

$$\eta_c = \eta_{c_{max}}(-1,6082 + 4,6509\lambda - 2,0764\lambda^2) ; 0,75 < \lambda < 1,2 \quad (3.2.4)$$

Um motor de combustão interna com ignição por centelha apresenta eficiência máxima da combustão equivalente a 90% (Heywood, 1988). Assim, ao agregar a hipótese de mistura estequiométrica, isto é, λ unitário, tem-se η_c equivalente a 87%, aproximadamente.

No motor que opera em ciclo Diesel, o ar aspirado pela válvula de admissão entra em excesso no interior do cilindro, pois dessa forma aumenta-se a probabilidade de consumir todo o Diesel injetado na câmara de combustão (Heywood, 1988). A eficiência da combustão do Diesel é superior a 98%, pois as emissões de hidrocarbonos e monóxidos de carbono são inferiores a 2% (Heywood, 1988). Portanto, no presente trabalho, a eficiência da combustão para o motor de combustão interna operando em ciclo Diesel será de 99%.

A energia total liberada para o sistema pode ser obtida pela equação abaixo (Heywood, 1988),

$$Q_{total} = \eta_c m_c PCI \quad (3.2.5)$$

onde m_c é a massa de combustível admitida e PCI é o poder calorífico inferior do combustível.

Sendo a relação ar/combustível (AC) dada pela razão entre a massa de ar (m_{ar}) e a massa de combustível (m_c) e a soma dessas massas denominada massa da mistura (m_m), pode-se reescrever a Eq. (3.2.5) da seguinte forma,

$$Q_{total} = \eta_c \frac{m_m}{1+AC} PCI \quad (3.2.6)$$

O cálculo da massa de ar por ciclo pode ser obtida por meio dos parâmetros operacionais de vazão mássica de ar de admissão (V_{ar}), número de rotações por segundo do motor (N) e quantidade de cilindros (n_{cil}) pela expressão (Heywood, 1988),

$$m_{ar} = \frac{V_{ar}}{0,5 \cdot 3600 n_{cil} N} \quad (3.2.7)$$

Ao multiplicar as Eqs. (3.2.3) e (3.2.6) representa-se a liberação gradativa de energia para o sistema em termos do ângulo do virabrequim (Alla, 2002),

$$Q_c(\theta) = Q_{total} \cdot x(\theta) \quad (3.2.8)$$

Parte da energia liberada pela queima do combustível perde-se por transferência de calor por convecção pela parede do cilindro (Shudo, 2010). Em um contexto termodinâmico, a taxa de liberação de energia para o sistema ($\delta Q_c/d\theta$) é uma quantidade positiva, enquanto a taxa de transferência de calor a partir do sistema ($\delta Q_p/d\theta$) é uma quantidade negativa. A soma dessas duas taxas denomina-se de energia aparente conforme a Eq. (3.2.9),

$$\frac{\delta Q_a}{d\theta} = Q_{total} \frac{dx}{d\theta} - f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} \quad (3.2.9)$$

onde f_{cor} é uma constante que permite ajustar o termo de troca de calor pela parede do cilindro. Esta constante de correção torna-se necessária porque a equação de Woschni (Woschni, 1967), Eq. (3.3.5), que representa a troca de calor pela parede do cilindro, a ser discutida na próxima seção, tipicamente não corresponde ao resfriamento verificado experimentalmente (Shudo, 2002). Mais detalhes acerca da transferência de calor serão discutidos na seção 3.3.

3.3. Transferência de calor

Tendo em vista que neste trabalho o cilindro encontra-se com as válvulas fechadas, inicialmente a elevação da temperatura da mistura deve-se ao processo de compressão e atinge valor máximo durante a combustão (Heywood, 1980). A remoção de energia do interior do cilindro, nesta pesquisa, deve-se exclusivamente a transferência de calor por convecção pelas paredes do cilindro, pois esta forma de transferência mostra-se dominante em relação à condução e à radiação em um motor de combustão interna (Nieminem e Dincer, 2010). Além disso, a transferência de calor por radiação corresponde entre 3 e 4% da transferência total de calor (Lounici *et al.*, 2010). Vale destacar que não se considera a transferência de calor pelos produtos da combustão porque a válvula de descarga, por hipótese, encontra-se fechada.

Os modelos descritos a seguir e que representam o fenômeno físico da troca de calor convectivo são de natureza empírica (Shudo *et al.*, 2002). Geralmente a troca de calor nas paredes do cilindro é descrita por uma única equação (Borman e Nishiwaki, 1987) e esta hipótese será empregada na presente pesquisa.

Nusselt, em 1923, foi o primeiro a propor uma correlação empírica para a troca de calor em motores ao apresentar o coeficiente de transferência de calor (h) (Borman e Nishiwaki, 1987) em termos da pressão, temperatura e velocidade média do pistão, dado pela Eq. (3.3.1),

$$h = h_c + h_r \quad (3.3.1)$$

onde a parcela h_c representa a contribuição da transferência de calor por convecção e h_r agrega o efeito da troca por radiação sendo dados por,

$$h_c = 5,41 \cdot 10^{-3} P^{2/3} T^{1/3} (1 + 1,24 v_p) \quad (3.3.2)$$

$$h_r = \frac{4,21 \cdot 10^{-4}}{\left(\frac{1}{\varepsilon_g} + \frac{1}{\varepsilon_w} - 1\right)(T - T_p)} \left[\left(\frac{T}{100}\right)^4 - \left(\frac{T_p}{100}\right)^4 \right] \quad (3.3.3)$$

onde v_p é velocidade média do pistão, P é a pressão, T é a temperatura, T_p é a temperatura da parede do cilindro, ε_g é a emissividade do gás e ε_w é a emissividade da parede do cilindro. A Eq. (3.3.1) foi usada por Briling (1958) e Van Tyen (1962), que a modificaram ao trocar o termo $(1 + 1,24 v_p)$ por $(3,5 + 0,185 v_p)$ e $(3,22 + 0,864 v_p)$, respectivamente (Borman e Nishiwaki, 1987).

Eichelberg (1939) foi o primeiro a medir o fluxo de calor instantâneo e a correlação proposta foi amplamente empregada (Borman e Nishiwaki, 1987). O coeficiente de troca de calor estabelecido por Eichelberg considera a troca de calor por somente por convecção, conforme a Eq. (3.3.4) (Eichelberg, 1939),

$$h = 7,8 \cdot 10^{-3} P^{1/2} T^{1/2} v_p^{1/3} \quad (3.3.4)$$

Woschni (1967) propôs outra correlação para o coeficiente de transferência de calor convectivo, a qual inclui o efeito das dimensões da câmara de combustão e a velocidade da mistura gasosa (v_g), dada por,

$$h(W/m^2K) = 3,26 \cdot D(m)^{-0,2} P(kPa)^{0,8} T(K)^{-0,53} v_g(m/s)^{0,8} \quad (3.3.5)$$

onde v_g é expresso matematicamente por,

$$v_g = \begin{cases} 2,28v_p & , \text{ compressão} \\ 2,28v_p + 3,24 \cdot 10^{-3} \frac{V_d T_1}{P_1 V_1} [P - P_0] & , \text{ combustão e expansão} \end{cases} \quad (3.3.6)$$

de forma que P_0 é o campo de pressão sem ocorrência de combustão e T_1 , P_1 e V_1 correspondem, respectivamente, aos valores de temperatura, pressão e volume do fluido de trabalho no ângulo do virabrequim em que começa a combustão.

O pistão percorre o curso (L) duas vezes a cada giro de 360° do eixo de manivelas, de forma que a velocidade média do pistão (v_p) pode ser dada por,

$$v_p = 2LN \quad (3.3.6)$$

onde N é a rotação do motor em rad/s.

Em virtude da aplicabilidade da equação de Woschni em diversos trabalhos, esta será empregada na presente pesquisa.

3.4. Análise termodinâmica

O motor em estudo nesta pesquisa encontra-se com as válvulas fechadas e a Termodinâmica denomina esta situação física, onde não há fluxo mássico, de sistema fechado. Por conseguinte, um sistema de massa fixa será considerado.

A abordagem termodinâmica escolhida para representar os processos de compressão, combustão e expansão dentro da câmara de combustão baseia-se em um modelo zero-dimensional. Tal modelo surge da Primeira Lei da Termodinâmica (lei da conservação da energia), que para um sistema fechado estabelece que a variação da energia interna do sistema (dU) equivale à soma da variação da quantidade de calor aparente fornecido (δQ_a) com o trabalho executado pelo sistema ($-\delta W$) conforme a Eq. (3.4.1),

$$dU = \delta Q_a - \delta W \quad (3.4.1)$$

A Primeira Lei da Termodinâmica para um sistema fechado pode ser reescrita ao tomar variações do ângulo do eixo de manivelas como passo no tempo ($d\theta = \omega dt$) (Heywood, 1988),

$$\frac{dU}{d\theta} = \frac{\delta Q_a}{\delta\theta} - \frac{\delta W}{\delta\theta} \quad (3.4.2)$$

Adicionando a hipótese de gás ideal para a mistura na câmara de combustão, tem-se que a variação da energia interna pode ser expressa, para a massa da mistura (m_m), em termos do calor específico a volume constante (c_v), massa da mistura (m_m) e temperatura (T),

$$\frac{dU}{d\theta} = m_m \bar{c}_v \frac{dT}{d\theta} \quad (3.4.3)$$

O trabalho executado pelo sistema sobre a fronteira móvel (pistão) pode ser reescrito em termos da pressão (P) e variação do volume da câmara de combustão (V),

$$\frac{\delta W}{d\theta} = P \frac{dV}{d\theta} \quad (3.4.4)$$

A Eq. (3.4.2) será reescrita usando-se as Eqs. (3.2.9), (3.4.3) e (3.4.4),

$$m_m \bar{c}_v \frac{dT}{d\theta} = Q_{total} \frac{dx}{d\theta} - f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} \quad (3.4.5)$$

Manipulando-se algebricamente a Eq. (3.4.5), multiplicando o lado esquerdo por $(m_m \bar{R}T)^{-1}$ e o direito por $(PV)^{-1}$ encontra-se,

$$\frac{\bar{c}_v}{\bar{R}T} \frac{dT}{d\theta} = \frac{1}{PV} \left[Q_{total} \frac{dx}{d\theta} - f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} \right] - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad (3.4.6)$$

Como o gás é ideal por hipótese, os calores específicos a volume constante (\bar{c}_v) e pressão constante (\bar{c}_p) podem ser relacionados à constante universal dos gases (\bar{R}) por meio da entalpia do sistema, encontrando-se a seguinte relação na base molar (Potter e Somerton, 1993),

$$\bar{R} = \bar{c}_p - \bar{c}_v \quad (3.4.7)$$

A razão entre calores específicos (γ) é definida da forma,

$$\gamma = \frac{\bar{c}_p}{\bar{c}_v} \quad (3.4.8)$$

Substituindo a Eq. (3.4.8) na Eq. (3.4.7) obtém-se uma expressão para o calor específico a volume constante da forma,

$$\bar{c}_v = \frac{\bar{R}}{\gamma - 1} \quad (3.4.9)$$

que ao ser substituída na Eq. (3.4.6) e, realizando manipulação algébrica, permite reescrevê-la da maneira a seguir,

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left[\frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} \right] = \frac{1}{PV} \left[Q_{total} \frac{dx}{d\theta} - f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} \right] - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad (3.4.10)$$

A Eq. (3.4.10) fornece a evolução temporal da temperatura no interior do cilindro em função do ângulo do virabrequim.

A partir da equação de estado para um gás ideal pode-se obter a seguinte expressão para a temperatura,

$$T = \frac{PV}{m_m R} \quad (3.4.11)$$

e aplicando o operador $\frac{d}{d\theta}(\cdot)$ na Eq. (3.4.11) tem-se,

$$P \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP}{d\theta} = m_m R \frac{dT}{d\theta} \quad (3.4.12)$$

A equação que fornece a pressão na câmara de combustão em função do ângulo do virabrequim pode ser obtida substituindo-se as Eqs. (3.4.11) e (3.4.12) na Eq. (3.4.10) e multiplicando-a por PV encontra-se,

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left[P \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP}{d\theta} \right] = Q_{total} \frac{dx}{d\theta} - f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} \quad (3.4.13)$$

As Eqs. (3.4.6) e (3.4.13) representam o comportamento dos estados termodinâmicos (temperatura e pressão) da mistura formada por ar e combustível conforme se varia o ângulo do virabrequim, juntamente com as equações auxiliares (Eqs. (3.1.8), (3.2.3), (3.2.6) e (3.4.8)).

A troca de calor pela parede da câmara de combustão será modelada conforme a lei de resfriamento de Newton dada a seguir (Bughardt e Harbach, 1992),

$$\frac{\delta Q_p}{dt} = hA(\theta)[T(\theta) - T_p] \quad (3.4.14)$$

onde h pode ser dado pela Eq. (3.3.5), $A(\theta)$ é dado pela Eq. (3.1.7) e T_p é a temperatura da parede do cilindro, cujo valor será fornecido no capítulo 5.

Note que a Eq. (3.4.14) é transiente e para ser usada na modelagem matemática um motor de combustão interna esta deve ser expressa em função do ângulo do virabrequim. A relação entre o virabrequim (em graus) e o tempo (em segundos) é dada por (Heywood, 1988),

$$\Delta t = \frac{\Delta\theta(rad)}{N(rad/s)} \quad (3.4.15)$$

Multiplicando a Eq. (3.4.14) por $(N\Delta t)^{-1}$ e pela Eq. (3.4.15) tem-se a taxa de variação da troca de calor pela parede da câmara de combustão conforme o ângulo do eixo de manivelas,

$$\frac{\delta Q_p}{d\theta} = \frac{hA(\theta)}{N} [T(\theta) - T_p] \quad (3.4.16)$$

O coeficiente para a transferência de calor convectivo (h) não é uma propriedade termodinâmica, mas um parâmetro que inclui os efeitos como propriedades do fluido, comportamento do fluxo e geometria da superfície (Bughardt e Harbach, 1992).

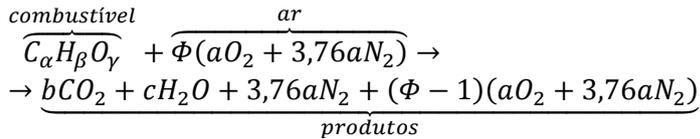
3.5. Reação química de combustão

Os motores de combustão interna conseguem energia a partir da combustão da mistura combustível-ar em uma reação exotérmica, isto é, com liberação de calor. Dessa forma, a energia química do combustível converte-se em energia interna nos gases no interior do cilindro (Pulkrabek, 1997).

O processo de combustão caracteriza-se pela oxidação dos constituintes do combustível. Durante a reação química a massa total permanece a mesma, de forma que no balanço da reação deve-se aplicar a lei da conservação da massa (Bughardt e Harbach, 2002).

As proporções de combustível e ar na composição dos reagentes para extrair energia contida no combustível podem ser estabelecidas da seguinte maneira (Heywood, 1988),

$$(3.5.1)$$



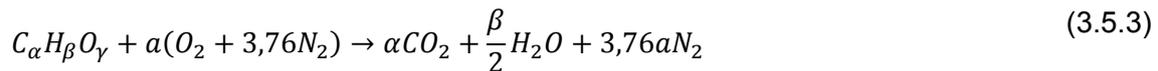
onde Φ é a razão de equivalência, que é definida como a relação entre a razão ar/combustível estequiométrica (AC_e) e a real (AC_r),

$$\Phi = \frac{AC_e}{AC_r} \quad (3.5.2)$$

e $\lambda = \Phi^{-1}$ é denominado de coeficiente de excesso de ar.

A Eq. (3.5.2) classifica a mistura de ar e combustível como pobre ($\Phi < 1$), estequiométrica ($\Phi = 1$) ou rica ($\Phi > 1$). Se a mistura for pobre significa que existe oxigênio nos gases de exaustão, se for estequiométrica combustível e oxidante estão balanceados e se for rica há presença de monóxido de carbono e combustível nos gases de exaustão. Na prática, para um motor de ignição por centelha, a razão de equivalência varia de 0,9 a 1,2 dependendo da condição operacional (Pulkrabek, 1997). Já em um motor de ignição por compressão torna-se interessante usar o coeficiente de excesso de ar, que tipicamente tem valor superior a 2 (Pulkrabek, 1997).

Neste estudo, para a simulação do motor operando em ciclo Otto, será adotada a hipótese de mistura estequiométrica ($\Phi = 1$) e, por isso, a equação de reação de combustão deve ser dada por,



Note que na Eq. (3.5.3) o Nitrogênio é inerte ou quimicamente neutro, pois não reage no processo químico. No entanto, deve ser contabilizado por afetar a temperatura e a pressão na câmara de combustão. Em motor Diesel ou Otto, o nitrogênio (N_2) é convertido em óxido de nitrogênio (NO_x).

4. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Neste capítulo disserta-se acerca dos métodos empregados para solucionar o problema físico pela abordagem determinística e estocástica. Para a formulação determinística usa-se o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, enquanto que para a solução estocástica emprega-se o Polinômio de Caos generalizado, o Método de Colocação Estocástica e o método de Monte Carlo (Apêndice A).

4.1. Solução determinística

Em um contexto de uma abordagem determinística, sem incerteza, uma solução numérica pode ser obtida usando métodos clássicos para resolver o sistema de equações diferenciais ordinárias, dados pelas Eqs. (3.4.10) e (3.4.13),

$$\frac{1}{\gamma - 1} \frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} = \frac{1}{PV} \left[Q_{total} \frac{dx}{d\theta} - f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} \right] - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.1.1)$$

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left[P \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP}{d\theta} \right] = Q_{total} \frac{dx}{d\theta} - f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.1.2)$$

onde o subscrito FVA indica fechamento da válvula de admissão e subscrito AVD indica abertura da válvula de descarga.

Nas Eqs. (4.1.1) e (4.1.2) o termo que representa a troca de calor convectivo ($\delta Q_p/d\theta$), descrito na Eq. (3.4.16), apresenta o coeficiente de transferência de calor convectivo (h). Portanto, para aplicação da equação de Woschni (Eq. (3.3.5)), necessita-se obter o perfil de pressão no cilindro sem a reação de combustão e, para tanto, resolve-se o sistema dado pelas Eqs. (4.1.1-2) considerando-se $x(\theta) = 0$ e $v_g = 2,28v_p$, juntamente com a condição inicial dada pelos valores de T_{adm} e P_{adm} que são, respectivamente, a temperatura e pressão na admissão,

$$\frac{1}{\gamma - 1} \frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} = -f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} \frac{1}{PV} - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.1.3)$$

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left[P \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP}{d\theta} \right] = -f_{cor} \frac{\delta Q_p}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.1.4)$$

$$T(\theta_{FVA}) = T_{adm} \quad (4.1.5)$$

$$P(\theta_{FVA}) = P_{adm} \quad (4.1.6)$$

onde todos os parâmetros serão fornecidos no capítulo 5.

O sistema de Eqs. (4.1.3-6) pode ser solucionado numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem e o perfil de pressão alcançado é o termo $P_0(\theta)$ na equação de Woschni (Eq. (3.3.5)). Assim, torna-se possível solucionar o sistema formado pelas Eqs. (4.1.1-2) e (4.1.5-6).

4.2. Técnicas de Quantificação de Incertezas

A investigação da aplicação das técnicas será realizada em duas etapas. Na primeira, a dimensão estocástica é unitária, pois as incertezas são consideradas unicamente na fração mássica de combustível queimado (x), para a qual se assume a forma,

$$X_e(\theta, \xi) = \bar{x}(\theta)(1 + \sigma\xi) ; 0 \leq \sigma \leq 1 \quad (4.2.1)$$

onde se representa o desvio padrão da média por σ , a variável aleatória (ξ) possui distribuição de probabilidade conhecida e a função $X_e(\theta, \xi)$ é a função de Wiebe estocástica. Vale destacar, que \bar{x} representa o valor médio da variável estocástica X_e dada pela Eq. (3.2.3).

A escolha da função de Wiebe para a análise de incertezas deve-se a seu caráter empírico e porque possui relevante influência nos campos de temperatura e pressão na câmara de combustão (Colaço, 2010). Por este motivo, a Eq. (3.2.3) não representa com precisão a energia instantânea liberada para o sistema e, também por esta razão, as incertezas devem ser agregadas. A inclusão da incerteza nessa correlação também se deve a modelagem simples adotada para a reação química de combustão.

Nessa primeira fase a técnica escolhida para solucionar numericamente o problema estocástico é o método Polinômio de Caos generalizado, cujos resultados serão confrontados com os do método de referência, que é a simulação de Monte Carlo (descrito no Apêndice A). Os detalhes acerca da aplicação ao problema proposto serão dissertados nas subseções a seguir.

A etapa seguinte da pesquisa consistirá no estudo de cinco problemas estocásticos a serem solucionados numericamente pelo Método de Colocação Estocástica (MCE) e a verificação do código computacional decorrerá do confronto com a simulação de Monte Carlo (MC). A finalidade de considerar problemas estocásticos distintos reside em analisar a sensibilidade dos parâmetros e/ou funções a fim de determinar onde as incertezas devem ser quantificadas, de forma a tornar as previsões numéricas dos valores máximos e mínimos das grandezas termodinâmicas

de interesse mais próximas da realidade. Os problemas estocásticos serão explicitados na seção que trata do Método de Colocação Estocástica, bem como a aplicação de tal método.

Vale destacar que o problema estocástico proposto da etapa 1 (PCg) considera a câmara de combustão adiabática, a fim de propagar as incertezas por meio da técnica Polinômio de Caos generalizado. Caso não fosse agregada a hipótese de câmara adiabática, o PCg determinaria um sistema determinístico de equações diferenciais ordinárias de elevada complexidade e a solução numérica seria inviável. Na etapa seguinte, que corresponde à propagação de incerteza por meio do MCE, esta hipótese será abandonada.

4.2.1. Polinômio de Caos Generalizado (PCg)

Esta subseção tem por objetivo discutir o método PCg, também denominado de método de Galerkin estocástico, uma vez que é uma generalização do método de Galerkin clássico aplicado a problemas determinísticos (Xiu, 2010).

O método impõe que a variável randômica tenha distribuição de probabilidade conhecida, podendo esta ser discreta ou contínua. Assim, neste trabalho, esta será considerada contínua e unidimensional (uma função com incerteza).

Em uma primeira aplicação desta técnica, será usado o caso em que não existe troca de calor convectivo entre os gases de combustão e as paredes do cilindro e o pistão, ou seja, câmara de combustão adiabática. Conseqüentemente, parte da energia liberada para o sistema a partir da combustão, que seria perdida por transferência de calor, deverá ser retida no interior do cilindro ocasionando aumento da temperatura e da pressão.

Abaixo segue o sistema de equações diferenciais ordinárias estocásticas que modela o problema com incertezas e a hipótese supracitada,

$$\frac{1}{\gamma - 1} \frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} = \frac{Q_{total}}{PV} \frac{dX_e}{d\theta} - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.2.1.1)$$

$$\frac{1}{\gamma - 1} \left[P \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP}{d\theta} \right] = Q_{total} \frac{dX_e}{d\theta} - P \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.2.1.2)$$

$$T(\theta_{FVA}) = T_{FVA} \quad (4.2.1.3)$$

$$P(\theta_{FVA}) = P_{FVA} \quad (4.2.1.4)$$

Nesta técnica obtém-se a solução por meio da projeção da solução em espaços de polinômios ortogonais (Ψ) definidos em variáveis aleatórias (ξ) e denominados de

Polinômios de Caos generalizado. Portanto, precisa-se definir uma base ou conjunto gerador do espaço de polinômios ortogonais $\{\Psi_i(\xi)\}_{i=0}^{n_p}$, tal que n_p é o maior grau do polinômio ortogonal da base.

Como a temperatura e a pressão dependem da fração mássica de combustível, estas passam a ser uma variável estocástica e juntamente com a função de Wiebe devem ser representadas por uma expansão espectral da seguinte maneira (Xiu, 2009),

$$\bar{T}(\theta, \xi) = \sum_{i=0}^{N_p} T_i(\theta) \Psi_i(\xi) \quad (4.2.1.5)$$

$$\bar{P}(\theta, \xi) = \sum_{i=0}^{N_p} P_i(\theta) \Psi_i(\xi) \quad (4.2.1.6)$$

$$X_e(\theta, \xi) = \sum_{i=0}^{N_p} x_i(\theta) \Psi_i(\xi) \quad (4.2.1.7)$$

onde N_p é a quantidade de termos na expansão espectral.

O número de termos na expansão é $N_p + 1$ e calcula-se esta grandeza por meio da quantidade de variáveis aleatórias (n_ξ) e pelo maior grau do PCg (n_p) na base de polinômios ortogonais conforme a expressão a seguir (Ghanem e Spanos, 1991, Xiu e Karniadakis, 2003),

$$N_p = 1 + \sum_{i=1}^{n_p} \frac{1}{i!} \prod_{j=0}^{i-1} (n_\xi + j) = \frac{(n_\xi + n_p)!}{n_\xi! n_p!} \quad (4.2.1.8)$$

A Tab. 4.1 relaciona cada tipo de distribuição de probabilidade com um Polinômio de Caos generalizado e estas relações denominam-se esquema de Askey (Ghanem e Spanos, 1991, Xiu, 2010).

Tabela 4.1 Esquema de Askey (Xiu, 2010)

	Distribuição (ξ)	PCg $\{\Psi(\xi)\}$	Suporte (\bar{S})
Contínuo	Gaussiano	Hermite	$(-\infty, \infty)$
	Gama	Laguerre	$[0, \infty)$
	Beta	Jacobi	$[a, b]$
	Uniforme	Legendre	$[a, b]$
Discreto	Poisson	Charlier	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Binomial	Krawtchouk	$\{0, 1, 2, \dots, N^1\}$
	Binomial negativa	Meixner	$\{0, 1, 2, \dots\}$
	Hypergeométrico	Hahn	$\{0, 1, 2, \dots, N^1\}$

¹ $N \geq 0$ é um número finito e inteiro.

Substituindo as Eqs. (4.2.1.5-7) nas Eqs. (4.2.1.1-2) tem-se a formulação estocástica das equações de governo,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\bar{\gamma} - 1} \sum_{i=0}^{N_P} \sum_{j=0}^{N_P} \frac{dT_i}{d\theta} P_j \Psi_i \Psi_j &= \\ &= \frac{Q_{total}}{V} \sum_{i=0}^{N_P} \sum_{k=0}^{N_P} T_i \frac{dx_k}{d\theta} \Psi_i \Psi_k - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \sum_{i=0}^{N_P} \sum_{j=0}^{N_P} T_i P_j \Psi_i \Psi_j \end{aligned} \quad (4.2.1.9)$$

$$V \sum_{j=0}^{N_P} \frac{dP_j}{d\theta} \Psi_j + \bar{\gamma} \frac{dV}{d\theta} \sum_{j=0}^{N_P} P_j \Psi_j = (\bar{\gamma} - 1) Q_{total} \sum_{k=0}^{N_P} \frac{dx_k}{d\theta} \Psi_k \quad (4.2.1.10)$$

A fim de garantir que o erro ao aproximar a solução por meio da expansão espectral seja ortogonal em relação ao espaço funcional gerado pela base de polinômios ortogonais, realiza-se uma projeção ortogonal definida pelo produto interno no espaço de Hilbert das variáveis ξ que é dado por (Xiu, 2010),

$$\langle (\cdot), \Psi_i \rangle := \int_{S_\xi} (\cdot) w(\xi) \Psi_i(\xi) d\xi \quad (4.2.1.11)$$

onde w é a função de densidade de probabilidade (*FDP*) e S_ξ é o suporte da variável aleatória. A *FDP* e o suporte dependem do tipo de distribuição de probabilidade escolhida conforme a Tab. 4.1.

Pela propriedade de ortogonalidade dos PCg, agregado a linearidade do produto interno no espaço de Hilbert, tem-se que ao aplicar a Eq. (4.2.1.11) nas Eqs. (4.2.1.9-10) encontra-se,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\bar{\gamma} - 1} \sum_{i=0}^{N_P} \sum_{j=0}^{N_P} \frac{dT_i}{d\theta} P_j e_{ijm} &= \\ &= \frac{Q_{Tot}}{V} \sum_{i=0}^{N_P} \sum_{k=0}^{N_P} T_i \frac{dx_k}{d\theta} e_{ikm} - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \sum_{i=0}^{N_P} \sum_{j=0}^{N_P} T_i P_j e_{ijm} \end{aligned} \quad (4.2.1.12)$$

$$V \frac{dP_m}{d\theta} \langle \Psi_m^2 \rangle + \bar{\gamma} \frac{dV}{d\theta} P_m \langle \Psi_m^2 \rangle = (\bar{\gamma} - 1) Q_{Tot} \frac{dx_m}{d\theta} \langle \Psi_m^2 \rangle \quad (4.2.1.13)$$

onde $e_{ijk} = \langle \Psi_i \Psi_j, \Psi_k \rangle$, $\langle \Psi_i^2 \rangle = \langle \Psi_i, \Psi_i \rangle$ e m é um número inteiro que varia de 0 até N_P .

Note que as equações de governo estocásticas para $T(\theta, \xi)$ e $P(\theta, \xi)$ tornaram-se um sistema de equações diferenciais ordinárias com $N_P + 1$ equações.

O mesmo procedimento deve ser aplicado a função de Wiebe estocástica $X_e(\theta, \xi)$, que representa a fração mássica de combustível queimado com incerteza. Assim, combinam-se as Eqs. (4.2.1.7) e (4.2.1),

$$x(\theta) + \sigma \xi x(\theta) = \sum_{i=0}^{N_p} x_i(\theta) \Psi_i(\xi) \quad (4.2.1.14)$$

Aplicando o produto interno na Eq. (4.2.1.14) e empregando a propriedade de ortogonalidade e a condição de linearidade, determina-se uma expressão para x_m ,

$$x_m(\theta) = \langle \Psi_m^2 \rangle^{-1} x(\theta) \{ \langle 1, \Psi_m \rangle + \mu \langle \xi, \Psi_m \rangle \} \quad (4.2.1.15)$$

As condições iniciais dadas pelas Eqs. (4.2.1.3-4) também devem ser projetadas na base $\{\Psi_i(\xi)\}_{i=0}^{n_p}$ por meio das Eqs. (4.2.1.5-6). Em seguida, aplica-se o produto interno de forma a obter as condições iniciais para o sistema de equações diferenciais ordinárias formado pelas Eqs. (4.2.1.16-17),

$$T_m(\theta_{FVA}) = T_{FVA} \langle \Psi_m^2 \rangle^{-1} \langle 1, \Psi_m \rangle \quad (4.2.1.16)$$

$$P_m(\theta_{FVA}) = P_{FVA} \langle \Psi_m^2 \rangle^{-1} \langle 1, \Psi_m \rangle \quad (4.2.1.17)$$

para $m = 0, \dots, N_p$, onde T_{FVA} e P_{FVA} são, respectivamente, temperatura e pressão no início do processo de compressão. Vale destacar que estas condições iniciais são consideradas constantes e, portanto, elas não são consideradas estocásticas nesta pesquisa.

O sistema de equações diferenciais ordinárias determinísticas obtido por meio do método de Polinômio de Caos generalizado com $N_p + 1$ equações é composto pelas Eqs. (4.2.1.12-13) e (4.2.1.17-18). Tal sistema é resolvido numericamente pelo método de Runge-Kutta de 4ª ordem no presente trabalho.

Com a resolução do sistema determinístico encontram-se os coeficientes T_i e P_i das Eqs. (4.2.1.5-6). Assim, obtém-se a forma analítica em um espaço aleatório para o processo de solução (Xiu, e Karniadakis 2003).

Os valores de pressão e temperatura no interior da câmara de combustão são fornecidos pelas médias das soluções, que está contida nas Eqs. (4.2.1.5) e (4.2.1.6) com índice zero (T_0 e P_0).

A variância da temperatura e a da pressão é calculada conforme (Xiu, 2010),

$$T_{\sigma^2}(\theta) = \sum_{i=1}^{N_P} [T_i^2(\theta)] \quad (4.2.1.18)$$

$$P_{\sigma^2}(\theta) = \sum_{i=1}^{N_P} [P_i^2(\theta)] \quad (4.2.1.19)$$

Note que no cálculo da variância excluiu-se a média, isto é, o somatório começa com índice 1.

A Fig. 4.1 exhibe o fluxograma da aplicação do método Polinômio de Caos generalizado ao modelo estocástico dado pelas Eq. 4.2.1.1-4.

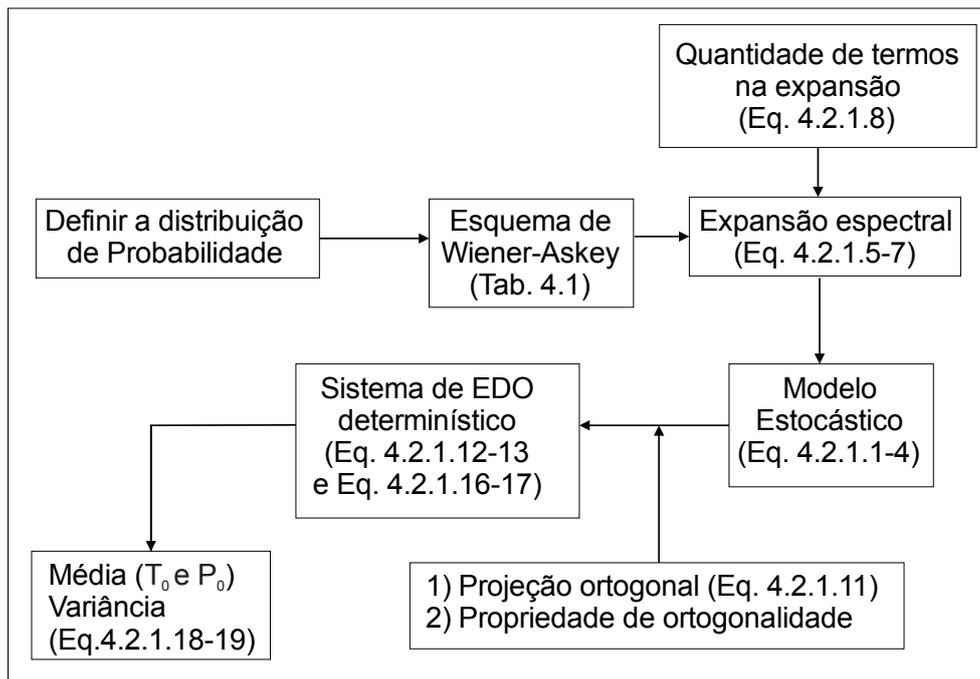


Figura 4.1 Fluxograma da aplicação do PCg ao modelo estocástico

Diferentemente do método de Polinômio de Caos generalizado, a simulação de Monte Carlo (apêndice A) é uma técnica não-intrusiva, uma vez que não se necessita alterar o código computacional elaborado para simular o funcionamento do motor.

4.2.2. Método de Colocação Estocástica (MCE)

O Método de Colocação Estocástica mostra-se vantajoso, frente ao Polinômio de caos generalizado, por obter um modelo determinístico com equações desacopladas e, que por não ser intrusivo, não aumenta a complexidade das equações. Mais ainda, a solução fornecida pelo MCE coincide com a solução do método de Galerkin estocástico (Babuska *et al.*, 2005).

A técnica amostral de quantificação de incertezas, alvo dessa seção, foi desenvolvida em 2003 por Mathelin e Hussaini, cujo objetivo foi reduzir o custo computacional do método de Polinômio de Caos (Mathelin e Hussaini, 2003).

Os métodos de colocação fazem parte de uma classe de técnicas que solucionam equações diferenciais ordinárias/parciais em um conjunto de pontos pré-determinados. (Hussaini *et al.*, 1989). Assim, a simulação de Monte Carlo é um método de colocação, onde o conjunto de pontos é obtido de forma aleatória a partir de uma distribuição de probabilidade. Diferentemente, o MCE obtém a solução aproximada em pontos que não são aleatórios.

A ideia do Método de Colocação Estocástica reside na resolução do problema estocástico em um conjunto de pontos em um espaço estocástico e, a partir dessas soluções, constrói-se uma função de interpolação no espaço estocástico que melhor aproxima a solução desejada. Vale destacar que as funções de interpolação são ortogonais entre si, o que garante o desacoplamento das equações e, dessa maneira, o sistema de equações diferenciais ordinárias/parciais estocásticas torna-se um conjunto de equações determinísticas desacopladas, que pode ser solucionado numericamente por técnicas clássicas (Ganapathysubramanian e Zabarar, 2007).

O Método de Colocação Estocástica será aplicado em 5 modelos estocásticos, que se diferenciam entre si pela dimensão do espaço estocástico e em quais parâmetros e/ou funções serão quantificadas as incertezas. Assim, como elucidado na seção 4.2.1, formula-se o modelo estocástico a partir do modelo determinístico ao serem incluídas incertezas em parâmetros e/ou funções. Portanto, cada um dos 5 modelos estocásticos são reformulações das Eqs. (4.1.1) e (4.1.2) juntamente com as condições iniciais dadas pelas Eqs. (4.1.5) e (4.1.6).

Abaixo seguem os parâmetros ou funções com incertezas adotados em cada modelo estocástico investigado nesta subseção. A elaboração de cada formulação estocástica segue uma ordem crescente para a dimensão estocástica, isto é, Modelo 1 terá a menor dimensão estocástica e a maior será do Modelo 5. Vale frisar que todos os modelos estocásticos propostos considerarão a troca de calor entre os gases no interior do cilindro com as paredes do mesmo, para um motor de combustão interna com ignição por centelha.

O **Modelo 1** considera as incertezas, exclusivamente, no parâmetro que representa a razão entre calores específicos (γ), tal como na Eq. (4.2.2.5),

$$\gamma_e = \bar{\gamma}(1 + \sigma_1 \xi_1) \quad (4.2.2.5)$$

Assim, tal modelo estocástico tem dimensão estocástica unitária. A escolha da propriedade termodinâmica γ para incluir a incerteza, se deve a sua relevante influência na troca de calor pelas fronteiras da câmara de combustão (Brunt *et al.*, 1998). Conseqüentemente, variar γ acarreta mudanças na quantidade de energia disponível para a geração de trabalho pelo pistão. Assim, o modelo estocástico é muito sensível a tal grandeza termodinâmica.

O **Modelo 2** quantificará as incertezas por meio da inserção, de maneira linear, de variáveis aleatórias conforme a seguir,

$$h_e(\theta, \xi_1) = \bar{h}(\theta)(1 + \sigma_1 \xi_1) \quad (4.2.2.1)$$

$$X_e(\theta, \xi_2) = \bar{x}(\theta)(1 + \sigma_2 \xi_2) \quad (4.2.2.2)$$

onde ambas as funções estocásticas tem seus valores em torno de um valor médio com desvios-padrão distintos. Cabe ressaltar que inserir incerteza na função de Wiebe (x) se deve a sua natureza empírica e, portanto, com incerteza inerente. Da mesma forma, a correlação de Woschni foi proposta empiricamente e, pelo mesmo motivo, torna-se interessante que incertezas sejam agregadas.

O **Modelo 3** será proposto a fim de investigar a propagação das incertezas, durante o funcionamento de um motor Otto, ao incluir as incertezas na razão entre calores específicos, na função de Wiebe e no coeficiente de troca de calor convectivo conforme,

$$h_e(\theta, \xi_1) = \bar{h}(\theta)(1 + \sigma_1 \xi_1) \quad (4.2.2.3)$$

$$X_e(\theta, \xi_2) = \bar{x}(\theta)(1 + \sigma_2 \xi_2) \quad (4.2.2.4)$$

$$\gamma_e = \bar{\gamma}(1 + \sigma_3 \xi_3) \quad (4.2.2.5)$$

Note que o Modelo 3 é uma fusão dos 2 modelos anteriores e, por isso, visa avaliar como as incertezas se propagam por meio desses 3 parâmetros ao mesmo tempo. Assim, será possível verificar a sensibilidade do modelo às diferentes configurações desses 3 parâmetros.

O **Modelo 4** possui dimensão estocástica igual a 3, pois as incertezas são agregadas aos parâmetros a_w e m_w da Equação de Wiebe (Eq. 3.2.3) e à razão entre calores específicos (γ), da seguinte maneira,

$$a_{w_e} = \bar{a}_w(1 + \sigma_1 \xi_1) \quad (4.2.2.6)$$

$$m_{w_e} = \bar{m}_w(1 + \sigma_2 \xi_2) \quad (4.2.2.7)$$

$$\gamma_e = \bar{\gamma}(1 + \sigma_3 \xi_3) \quad (4.2.2.8)$$

onde σ_i representa o desvio padrão da média e a variável aleatória por ξ_i para $i = 1, 2, 3$. Vale destacar, que \bar{a}_w , \bar{m}_w e $\bar{\gamma}$ são os valores médios dos parâmetros estocásticos a_{w_e} , m_{w_e} e $\bar{\gamma}$, respectivamente. Perceba que as incertezas foram incluídas por meio de variáveis aleatórias distintas (ξ_1 , ξ_2 e ξ_3) e com desvios-padrão (σ) distintos para os 3 parâmetros com incerteza ($0 \leq \sigma \leq 1$).

Seguindo o mesmo princípio, tem-se a inclusão das incertezas para formular o **Modelo 5**,

$$a_{w_e} = \bar{a}_w(1 + \sigma_1 \xi_1) \quad (4.2.2.9)$$

$$m_{w_e} = \bar{m}_w(1 + \sigma_2 \xi_2) \quad (4.2.2.10)$$

$$\gamma_e = \bar{\gamma}(1 + \sigma_3 \xi_3) \quad (4.2.2.11)$$

$$h_e(\theta, \xi_4) = \bar{h}(\theta)(1 + \sigma_4 \xi_4) \quad (4.2.2.12)$$

onde h_e é o coeficiente de transferência de calor convectivo estocástico e, dessa forma, a dimensão estocástica equivale a 4.

Para mostrar a aplicação do Método de Colocação Estocástica, os procedimentos serão realizados em um dos 5 modelos estocásticos propostos. Então, escolheu-se o Modelo 5 por ser aquele de maior dimensão estocástica e o equacionamento deste é dado a seguir,

$$\frac{1}{\gamma_e - 1} \frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} = \frac{1}{PV} \left[Q_{total} \frac{dX_e}{d\theta} - f_{cor} \left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e \right] - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.2.2.13)$$

$$\frac{1}{\gamma_e - 1} \left[P \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP}{d\theta} \right] = Q_{total} \frac{dX_e}{d\theta} - f_{cor} \left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e - P \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.2.2.14)$$

$$T(\theta_{FVA}) = T_{adm} \quad (4.2.2.15)$$

$$P(\theta_{FVA}) = P_{adm} \quad (4.2.2.16)$$

onde

$$\left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e = h_e(\theta, \xi_4) A(\theta) [T(\theta) - T_p] \quad (4.2.2.17)$$

$$X_e(\theta, \xi_1, \xi_2) = \begin{cases} 0 & , \quad \theta < \theta_0 \\ 1 - \exp \left[-a_{we}(\xi_1) \left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta} \right)^{m_{we}(\xi_2)+1} \right] & , \quad \theta_0 \leq \theta \leq \theta_0 + \Delta\theta \\ 1 & , \quad \theta > \theta_0 + \Delta\theta \end{cases} \quad (4.2.2.18)$$

No presente trabalho o Método de Colocação Estocástica será aplicado via interpolação de Lagrange juntamente com um esquema de malha esparsa, a serem elucidados a seguir.

O Método de Colocação Estocástica via interpolação de Lagrange para problemas multidimensionais decorre da expansão espectral das variáveis estocásticas dependentes em termos dos polinômios ortogonais de Lagrange (ℓ) de ordem $n_p + 1$ satisfazendo $\ell_i(\xi_j) = \delta_{ij}$, $0 \leq i, j \leq n_p$ (Jakeman *et al.*, 2010),

$$P(\theta, \xi) = \sum_{i=0}^{n_p} P_i(\theta, \xi_i) \ell_i(\xi) \quad (4.2.2.19)$$

$$T(\theta, \xi) = \sum_{i=0}^{n_p} T_i(\theta, \xi_i) \ell_i(\xi) \quad (4.2.2.20)$$

onde $\{\xi_i\}_{i=0}^{n_p}$ são os pontos de colocação, as variáveis P_i e T_i são as soluções nos pontos de colocação e δ_{ij} é o delta de Kronecker.

Substituindo as Eqs (4.2.2.19-20) nas Eqs. (4.2.2.13) e (4.2.2.14) e usando a propriedade de ortogonalidade dos polinômios de Lagrange, determina-se um sistema de equações diferenciais parciais determinísticas para cada ponto de colocação,

$$\frac{1}{\gamma_e - 1} \frac{1}{T_i} \frac{dT_i}{d\theta} = \frac{1}{P_i V} \left[Q_{total} \frac{dX_e}{d\theta} - f_{cor} \left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e \right] - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.2.2.21)$$

$$\frac{1}{\gamma_e - 1} \left[P_i \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP_i}{d\theta} \right] = Q_{total} \frac{dX_e}{d\theta} - f_{cor} \left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e - P_i \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (4.2.2.22)$$

$$T(\theta_{FVA}) = T_{adm} \quad (4.2.2.23)$$

$$P(\theta_{FVA}) = P_{adm} \quad (4.2.2.24)$$

O conjunto de equações formado pelas Eqs. (4.2.2.21-24) deve ser solucionado numericamente, tal como explicado na subseção 4.1, para cada ponto de colocação.

Vale salientar que um aspecto relevante no Método de Colocação Estocástica reside na escolha dos pontos de colocação ξ_i e, principalmente, sobre a disposição destes na malha.

Será empregada uma técnica geral de discretização numérica denominada de malha esparsa. Este método também é chamado de algoritmo de Smolyak, pois foi introduzido em 1963 pelo matemático russo Smolyak (Gerstner e Griebel, 2008). Esse algoritmo constrói um método n -dimensional a partir de um unidimensional e configura de forma eficiente a malha de pontos. Em outras palavras, com base em uma função de interpolação 1D determina-se outra para um espaço multidimensional (DeVore *et al.*, 2001).

O polinômio interpolador de dimensão N tem por base um produto tensorial de funções unidimensionais de interpolação. Tal função é suave, isto é, possui derivada de todas as ordens e $f: [0,1]^N \rightarrow \mathbb{R}$. Para $N = 1$ tem-se a seguinte fórmula de quadratura unidimensional para aproximar a função f (Xiu e Hesthaven, 2005),

$$\mathcal{U}^i[f] := \sum_{j=1}^{m_i} c_j^i f(t_j^i) \quad (4.2.2.25)$$

onde $c_j^i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$ e seja \mathcal{U}^i um funcional linear.

Então se define o produto tensorial dos operadores $\mathcal{U}^1, \dots, \mathcal{U}^n$ (Xiu e Hesthaven, 2005),

$$(\mathcal{U}^{i_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{U}^{i_n})[f] := \sum_{j_1}^{m_{i_1}} \dots \sum_{j_n}^{m_{i_n}} c_{j_1}^{i_1} \dots c_{j_n}^{i_n} f(t_{j_1}^{i_1}, \dots, t_{j_n}^{i_n}) \quad (4.2.2.26)$$

O algoritmo de Smolyak (Xiu e Hesthaven, 2005) é uma combinação linear conveniente dos produtos tensoriais, com o objetivo de usar um pequeno número de valores da função, que é dado por (Xiu e Hesthaven, 2005),

$$\mathcal{A}_{q,n}[f] = \sum_{q-n+1 \leq |i| \leq q} (-1)^{q-|i|} \cdot \binom{n-1}{q-|i|} \cdot (\mathcal{U}^{i_1} \otimes \dots \otimes \mathcal{U}^{i_n}) \quad (4.2.2.27)$$

onde $q \geq n$, $i = [i_1, \dots, i_n]$ com inteiros $i_j \geq 1$, $|i| = i_1 + \dots + i_n$, $i_k, k = 1, \dots, n \in \mathbb{N}^n$, representa o nível de interpolação na k -ésima dimensão, q é a quantidade de pontos na malha e n é a dimensão estocástica.

Seja $\mathcal{U}^{(1)}, \mathcal{U}^{(2)}, \dots$, uma sequência de fórmulas de quadratura com n pontos de quadratura e $\mathcal{U}^{(0)}[f] = 0$, então defina (Xiu e Hesthaven, 2005),

$$\Delta^{(i)} := \mathcal{U}^{(i+1)} - \mathcal{U}^{(i)} \quad (4.2.2.28)$$

Então se tem a n -ésima fórmula de quadratura de Smolyak ao reescrever a Eq. (4.2.2.27) (Xiu e Hesthaven, 2005),

$$\mathcal{A}_{q,n}[f] = \sum_{|i| \leq q} (\Delta^{i_1} \otimes \dots \otimes \Delta^{i_n})[f] = \mathcal{A}_{q-1,n}[f] + \sum_{|i|=q} (\Delta^{i_1} \otimes \dots \otimes \Delta^{i_n})[f] \quad (4.2.2.29)$$

pela recursividade do algoritmo de Smolyak as funções não precisam ser reavaliadas em todos os pontos a cada nível de interpolação.

Assim, obtêm-se as malhas esparsas e, para um mesmo nível de interpolação, a ordem do erro iguala-se aquele associado ao tensor completo. Dessa forma, realiza-se a escolha ótima dos pontos de colocação, em virtude da diminuição da quantidade de pontos na malha mantendo-se a precisão de um tensor completo (Bungartz e Griebel, 2004).

Note que a informação usada pelo algoritmo $\mathcal{A}_{q,n}[f]$ consiste nos valores da função $f(t_{j_1}^{i_1}, \dots, t_{j_n}^{i_n})$, $j_k \leq m_{i_k}$ nos pontos $t_{j_k}^{i_k}$ da malha. Logo, estabelecido como se configuram as malhas esparsas, faz-se necessário escolher os pontos de colocação.

Devido ao caráter recursivo do algoritmo de Smolyak, torna-se interessante que o conjunto de abscissas \mathcal{X}^i satisfaça a condição $\mathcal{X}^i \subseteq \mathcal{X}^{i+1}$. Essa propriedade é satisfeita pela interpolação de Clenshaw-Curtis, cuja base é formada pelos polinômios de Lagrange definidos nos extremos dos polinômios de Chebyshev (Xiu, 2010). Para o número total de pontos m_i com $1 \leq i \leq n$, as abscissas são dadas por (Xiu, 2010),

$$t_i^{(j)} = -\cos \left[\frac{\pi(j-1)}{m_i^k - 1} \right], \quad j = 1, \dots, m_i^k \quad (4.2.2.30)$$

$$t_i^{(1)} = 0 \quad (4.2.2.31)$$

$$m_i^1 = 1 \quad (4.2.2.32)$$

$$m_i^k = 2^{k-1} + 1, i > 1 \quad (4.2.2.33)$$

onde k representa o nível da malha de Clenshaw-Curtis e, dessa forma, se garante que $\mathcal{X}^i \subseteq \mathcal{X}^{i+1}$, para $i \in \mathbb{N}$. Assim a Fig. 4.2 apresenta os pontos de colocação de um espaço estocástico bidimensional, onde o nível 2 (verde) contém os pontos de colocação do nível 1 (preto) e assim por diante.

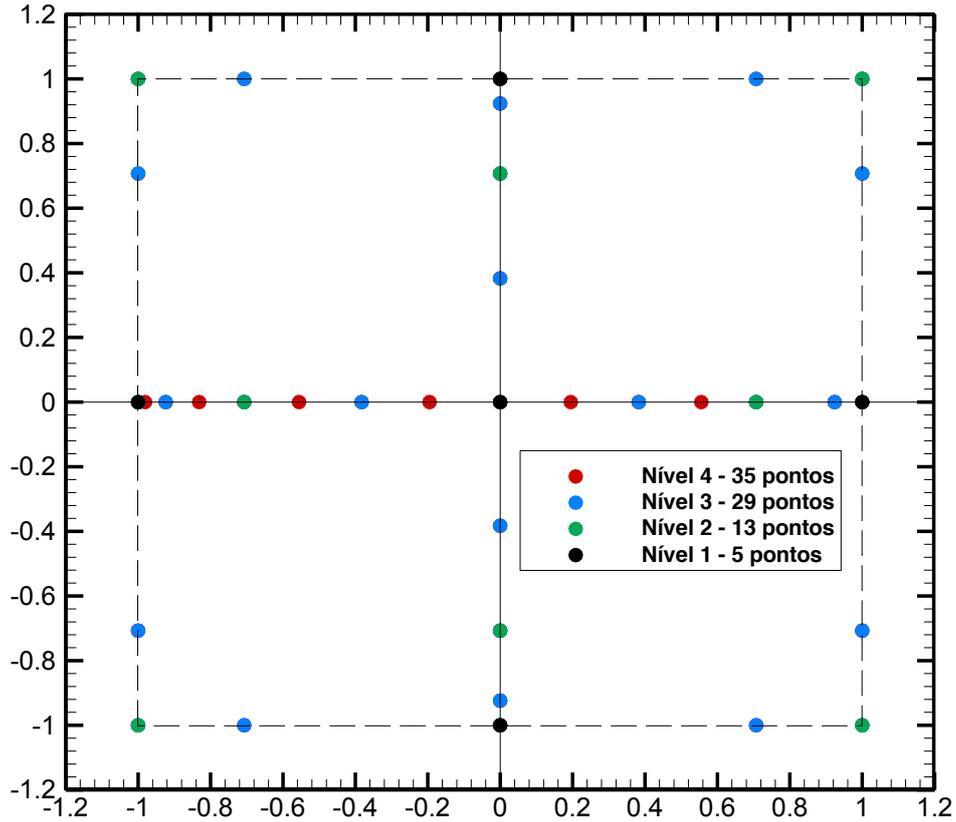


Figura 4.2 Malha esparsa de Clenshaw-Curtis

Vale frisar que as malhas esparsas de Clenshaw-Curtis são apropriadas para variáveis aleatórias com distribuição uniforme (Jakeman *et al.*, 2010).

A Fig. 4.2 mostra a malha esparsa 2D do nível 1 ao 4 obtida com as abcissas de Clenshaw-Curtis por meio do algoritmo de Smolyak.

Em posse das soluções (P_i e T_i) em cada ponto de colocação, calculam-se os momentos estocásticos da pressão e da temperatura, que são dadas pela média de cada grandeza (Loeven *et al.*, 2006),

$$\bar{P}(\theta) = \sum_{i=1}^{n_p} P_i(\theta, \xi_i) w_i \quad (4.2.2.34)$$

$$\bar{T}(\theta) = \sum_{i=1}^{n_p} T_i(\theta, \xi_i) w_i \quad (4.2.2.35)$$

onde w_i é o peso que corresponde a cada ponto de colocação, que pode ser obtido da seguinte forma em $[-1, 1]$ (Waldvogel, 2003),

$$w_i = \frac{c_i}{n_p} \left(1 - \sum_{k=1}^{\frac{n_p}{2}} \frac{b_k}{4k^2 - 1} \cos \left(2k \cdot i \frac{\pi}{n_p} \right) \right), \quad i = 0, \dots, n_p \quad (4.2.2.36)$$

onde $n_p \geq 2$, n_p é o número de pontos de colocação e

$$b_k = \begin{cases} 1, & k = n_p/2 \\ 2, & k < n_p/2 \end{cases} \quad (4.2.2.37)$$

$$c_i = \begin{cases} 1, & k = 0, n_p \\ 2, & k \neq 0, n_p \end{cases} \quad (4.2.2.38)$$

Nos extremos do intervalo $[-1, 1]$, os pesos são dados por (Waldvogel, 2003),

$$w_0 = w_{n_p} = \frac{1}{n_p^2 - 1 + \text{mod}(n_p, 2)}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (4.2.2.39)$$

onde $\text{mod}(n, 2)$ assume os valores correspondentes ao resto da divisão de n por 2.

A variância é dada por (Loeven *et al.*, 2007),

$$P_{\sigma^2}(\theta) = \sum_{i=1}^{n_p} [P_i(\theta, \xi_i)]^2 w_i - [\bar{P}(\theta)]^2 \quad (4.2.2.40)$$

$$T_{\sigma^2}(\theta) = \sum_{i=1}^{n_p} [T_i(\theta, \xi_i)]^2 w_i - [\bar{T}(\theta)]^2 \quad (4.2.2.41)$$

Por meio das Eqs. (4.2.2.34-35) e (4.2.2.40-41) pode-se investigar o impacto das incertezas nos parâmetros e funções do modelo estocástico, bem como nos perfis de pressão ou temperatura.

A Fig. 4.3 apresenta o fluxograma da aplicação do Método de Colocação Estocástica com malha esparsa a um modelo estocástico. Vale salientar que os passos indicados no fluxograma se aplicam a cada um dos cinco modelos estocásticos propostos nessa subseção.

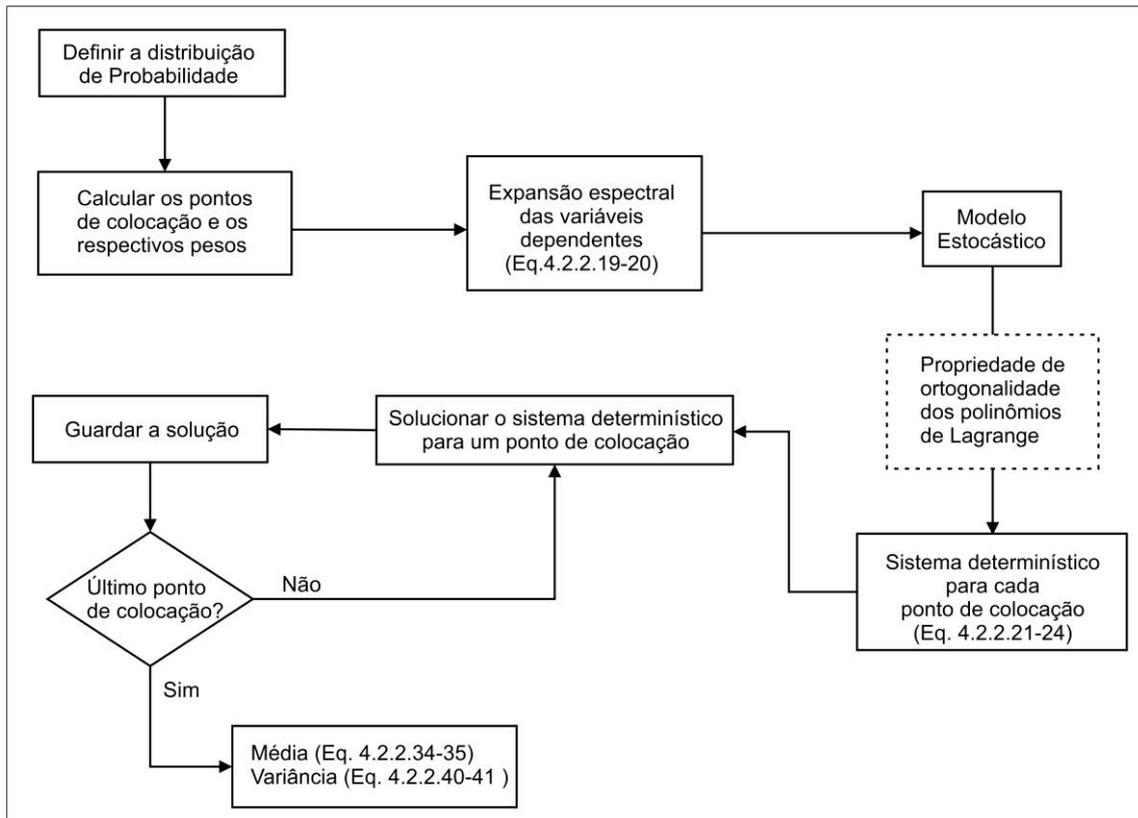


Figura 4.3 Fluxograma da aplicação do MCE ao modelo estocástico

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo encontram-se os resultados da simulação do motor sem a propagação de incertezas (determinístico) e com a propagação de incertezas (estocástico). Inicialmente o modelo estocástico representou o fenômeno de combustão em uma câmara adiabática e foi solucionado pelo método de Polinômio de Caos generalizado. Em seguida, foi agregada à formulação estocástica a hipótese de troca de calor por convecção e a propagação das incertezas ocorreu por meio do Método de Colocação Estocástica com malha esparsa.

Os resultados obtidos pelas técnicas de propagação de incertezas PCg e MCE foram confrontados com aqueles provenientes da simulação de Monte Carlo. Tal comparação deveu-se ao fato do método MC ser uma técnica clássica e, por isso, os resultados fornecidos pela mesma foram considerados de referência.

O computador utilizado nas simulações possui processador Intel Core i7 – 3610QM 2,3 GHz e 8 Gb de memória RAM.

O motor de combustão interna operando em ciclo Otto simulado computacionalmente sem e com a propagação de incertezas foi produzido pela Volkswagen (VW), 1.8 AP, *Flex-Fuel*, ano 2005, com 4 cilindros em linha, 2 válvulas em cada cilindro (admissão e exaustão), comando de válvulas no cabeçote e seus dados técnicos estão dispostos na Tab. 5.1.

Tabela 5.1 Dados técnicos do motor (Melo, 2007)

Símbolo	Parâmetros	Valores
D	Diâmetro do cilindro (mm)	81,01
S	Curso do pistão (mm)	86,4
l	Comprimento da biela (mm)	144,0
V_d	Cilindrada total (cm ³)	1781
r	Razão de compressão	11:1
θ_{FVA}	Ângulo de fechamento da válvula de admissão ¹	-164°
θ_{AVD}	Ângulo de abertura da válvula de descarga ¹	+146°
	Gasolina	Etanol
	Potência máxima	76 kW em 5250 rpm / 78 kW e 5250 rpm
	Torque máximo	153 Nm em 3000 rpm / 157 Nm e 3000 rpm

¹Ponto morto superior corresponde ao ângulo 0°

Os dados de entrada para a simulação computacional relativo à condição operacional foram obtidos experimentalmente por Melo (2007) em um banco de provas, cujo motor foi abastecido com etanol hidratado, com torque igual a 75 Nm, 2500 rpm e estão reportados na Tab. 5.2. Cabe mencionar que Melo (2007) empregou um modelo termodinâmico computacional a fim de simular os processos de compressão, combustão e expansão da gasolina, etanol hidratado e gás natural para

predizer o desempenho de um motor com tecnologia Flex e kit de gás natural veicular (GNV) instalado. Além disso, Melo (2007) validou os resultados simulados ao compará-los com resultados experimentais.

Existem outros parâmetros presentes no modelo matemático que foram ajustados conforme os dados experimentais (Melo, 2007) e estes estão dispostos na Tab. 5.3. O etanol hidratado é o combustível empregado nesta pesquisa.

A Tabela 5.4 apresenta as propriedades do etanol hidratado empregado para simular computacionalmente o motor de combustão interna, onde a sigla ASTM significa *American Society for Testing and Materials*

Tabela 5.2 Dados de entrada obtidos experimentalmente (Melo, 2007)

Descrição	Parâmetro	Valor	Unidade
Temperatura na parede	T_p	105	°C
Temperatura do ambiente	T_∞	34	°C
Temperatura na admissão	T_{adm}	39	°C
Pressão na admissão	P_{adm}	66,78	kPa
Rotação	N	2494	rpm
Vazão de ar	V_{ar}	85,07	kg h ⁻¹
Vazão de combustível	V_c	10,11	kg h ⁻¹
Razão ar-combustível estequiométrica	AC_e	8,417	----

Tabela 5.3 Parâmetros ajustáveis do modelo matemático (Melo, 2007)

Descrição	Parâmetro	Valor	Unidade
Início do processo de compressão	θ_{FVA}	-164	°
Início da combustão	θ_0	-10,2	°
Duração da combustão	$\Delta\theta$	38,2	°
Fator de correção para a troca de calor convectivo	f_{cor}	1,53	----
Coeficiente da equação de Wiebe	a_w	5	----
Coeficiente da equação de Wiebe	m_w	2	----
Razão entre calores específicos	γ	1,3404	----

Tabela 5.4 Propriedades do etanol (Melo, 2007)

Propriedade	Método utilizado	Valor
Massa específica a 20°C (kg/m ³)	ASTM D4052	810,5
Poder calorífico superior (MJ/kg)	ASTM D4809	27,478
Poder calorífico inferior (MJ/kg)	ASTM D4809	24,804
Oxigênio (%m)	ASTM D5622	37,6
Hidrogênio (%m)	ASTM D5291	12,8
Carbono (%m)	ASTM D5291	49,6
Relação molar HC	ASTM D5291	3,075
Relação molar OC	ASTM D5622	0,569
Combustível equivalente	$C_{2,15} H_{6,62} O_{1,23}$	
Relação ar-combustível estequiométrica	8,417	
H ₂ O (%V)	7,0	

5.1. Problema determinístico

O objetivo principal desta seção é resolver o problema proposto e confrontá-lo com dados experimentais, a fim de validar o código computacional confeccionado no software Mathematica® para simular o funcionamento do motor com troca de calor entre os gases da câmara de combustão e as paredes do cilindro.

A solução numérica do modelo matemático formado pelas Eqs. (4.1.3-6), que é um sistema de equações diferenciais ordinárias acoplado e não-linear, foi obtida pelo programa Mathematica® e todos os dados de entrada estão disponíveis nas Tabs. 5.1-4.

O tempo gasto para solucionar numericamente o modelo determinístico foi inferior a 6 segundos. Considerando esse intervalo de tempo como esforço computacional, este pode ser considerado interessante, pois a técnica amostral MC soluciona o modelo determinístico diversas vezes.

A evolução da pressão do gás no interior do cilindro, resultante da solução numérica, simula o funcionamento do motor abastecido com etanol hidratado para a condição operacional de 2500 rpm e 75 Nm. A comparação entre a pressão numérica e a experimental pode ser vista na Fig. 5.1, onde é possível aferir a coerência entre as curvas e o código numérico encontra-se validado. Cabe lembrar que a curva de pressão simulada numericamente corresponde à modelagem sem incerteza do fenômeno físico no interior do cilindro incluindo a troca de calor convectiva entre a mistura gasosa no interior da câmara de combustão e as superfícies que a delimitam (superfícies laterais e superior do cilindro e cabeça do pistão).

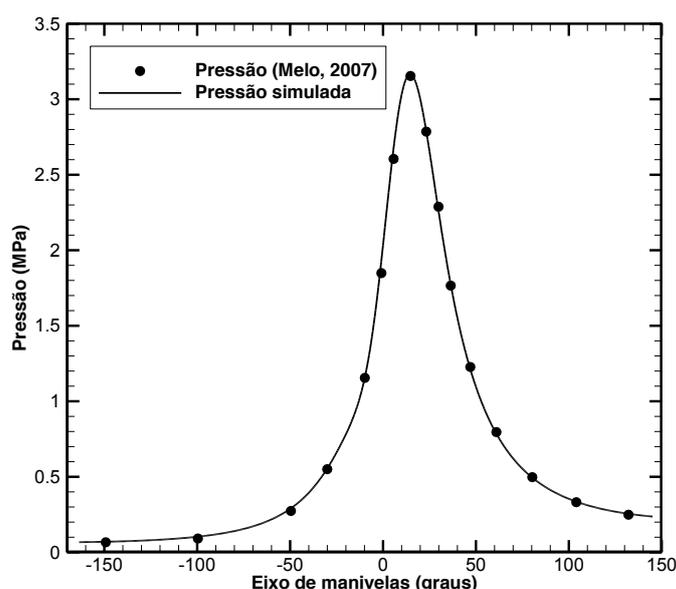


Figura 5.1 Comparação da pressão simulada com a experimental

Embora o perfil de temperatura seja obtido juntamente com o campo de pressão, somente a pressão é utilizada para verificar o resultado alcançado, pois os dados experimentais disponibilizados são sobre a pressão.

Uma vez validado o programa que simula o funcionamento do motor, procede-se com a propagação de incertezas na simulação computacional do funcionamento do motor de combustão interna na próxima seção.

5.2. Problema estocástico

Esta seção apresenta os resultados alcançados nas duas etapas de investigação das técnicas de propagação de incertezas. Na subseção 5.2.1, apresenta-se a aplicação do método do Polinômio de Caos generalizado ao problema estocástico com a hipótese de câmara de combustão adiabática e, na subseção 5.2.2, reporta-se os resultados do Método de Colocação Estocástica aplicado a diferentes modelagens estocásticas do fenômeno físico no interior do cilindro de um motor de combustão interna operando em ciclo Otto e agregando a hipótese de troca de calor convectivo pelas paredes do cilindro.

Na propagação de incertezas por meio do método de Polinômio de Caos generalizado serão consideradas incertezas com distribuições de probabilidade Gaussiana ou Uniforme, pois estas são frequentemente empregadas na simulação computacional de fenômenos físicos sob incertezas. Já na propagação das incertezas, na simulação do funcionamento do motor Otto, pelo Método de Colocação Estocástica será pesquisado a influência das incertezas com distribuição exclusivamente Uniforme, pois nesse tipo de distribuição todos os valores do intervalo apresentam a mesma probabilidade de ocorrer e também porque não é conhecido o tipo de distribuição da variável estocástica.

Em ambas as etapas da pesquisa, um importante resultado é o intervalo de confiança e o intervalo de incerteza, que são adequados à distribuição Gaussiana e a Uniforme, respectivamente. Ambos os intervalos são determinados a partir dos momentos estocásticos (média e variância).

O intervalo de confiança (IC), para a distribuição Gaussiana, define um limite inferior e superior em torno da média onde se encontra o valor real com uma “confiança” definida. Mais detalhes podem ser encontrados na literatura (Cassandras e Lafortune, 2008). Esse Intervalo de Confiança é colocado simetricamente em torno da média, isto é, $[\mu - n\sigma, \mu + n\sigma]$, onde n varia conforme o nível de confiança. Por exemplo, para 95% de confiança n equivale a 1,95996.

Para as incertezas com distribuição Uniforme em $[a, b]$, existe uma probabilidade constante do valor ser encontrado em torno da média (μ) (Loeven *et al.*, 2006). Além disso, a distribuição uniforme também é denominada de distribuição retangular ou distribuição de probabilidade igual (Kotulski e Szczepinski, 2010).

A função de densidade de probabilidade (FDP) para tal distribuição é dada por (Kotulski e Szczepinski, 2010),

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{para } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{para } x < a \text{ e } x > b \end{cases} \quad (5.2.1)$$

A partir da FDP encontram-se o valor médio (μ) usando a definição de esperança matemática de uma variável aleatória contínua \mathbb{X} (Kotulski e Szczepinski, 2010),

$$\mu = E(\mathbb{X}) = \int_{-\infty}^{\infty} xf(x)dx = \int_a^b x \frac{1}{b-a} dx = \frac{b+a}{2} \quad (5.2.2)$$

A fórmula da variância de uma variável aleatória contínua \mathbb{X} é dada pela Eq. (5.2.3) (Kotulski e Szczepinski, 2010),

$$\sigma^2 = V(X) = E(\mathbb{X}^2) - \mu^2 = \int_a^b x^2 \frac{1}{b-a} dx - \left(\frac{b+a}{2}\right)^2 = \frac{(b-a)^2}{12} \quad (5.2.3)$$

Logo, o desvio padrão é dado por,

$$\sigma = \frac{b-a}{2\sqrt{3}} \quad (5.2.4)$$

Para um dado valor médio μ e uma dada variância σ^2 , tem-se os valores dos limites (Kotulski e Szczepinski, 2010),

$$a = \mu - \sqrt{3}\sigma \quad (5.2.5)$$

$$b = \mu + \sqrt{3}\sigma \quad (5.2.6)$$

Pela regra 3σ a variável aleatória de uma distribuição uniforme assume, por definição, todos os valores no intervalo $(\mu - \sqrt{3}\sigma, \mu + \sqrt{3}\sigma)$ (Kotulski e Szczepinski, 2010). Tal intervalo será chamado de Intervalo de Incerteza (I.I.)

Vale destacar que a distribuição uniforme é mais concentrada que a distribuição normal, pois a variável distribuída normalmente assume os valores no intervalo $(-3\sigma, 3\sigma)$ com probabilidade 0.9973, enquanto a variável com distribuição uniforme, para o mesmo intervalo, assume valores com probabilidade de 100% (Kotulski e Szczepinski, 2010). Justifica-se tal fato a partir da Eq. (5.2.4), de onde se tem,

$$3\sigma = \frac{\sqrt{3}}{2}(b - a) \quad (5.2.7)$$

que é maior do que a metade do comprimento do intervalo de distribuição.

Portanto, para uma variável aleatória com distribuição desconhecida, como ocorre no presente trabalho, onde as variáveis estão associadas a fenômenos físicos, torna-se interessante que sejam distribuídas uniformemente em um dado intervalo cujos valores sejam coerentes com o contexto físico.

5.2.1. Propagação de incertezas via PCg

A presente seção apresenta os resultados provenientes da simulação computacional sob incertezas de um motor de combustão interna, abastecido com biocombustível (etanol), via Polinômio de Caos generalizado. A formulação estocástica dos fenômenos físicos de compressão, combustão e expansão no interior do cilindro, agregando-se a hipótese de câmara de combustão adiabática, foi descrita na seção 4.2

Para verificar os resultados obtidos com o PCg usam-se os perfis de temperatura e pressão sob incerteza fornecidos pela simulação de Monte Carlo, pois essa técnica clássica foi escolhida como referência. Além disso, ambas as técnicas podem ser comparadas em relação à eficiência computacional, pois conhecidamente o algoritmo de MC apresenta um custo computacional elevado.

Nesta seção, o desempenho de cada uma das técnicas é estudado para diferentes distribuições de probabilidade. Considera-se uma distribuição uniforme para a variável estocástica X_e com ξ distribuído uniformemente em $[-1, 1]$. Também se considera X_e com distribuição Gaussiana, pois ξ segue uma distribuição normal com média zero e variância unitária, conforme Eq. (4.2.1),

$$X_e(\theta, \xi) = \bar{x}(\theta)(1 + \sigma\xi) ; 0 \leq \sigma \leq 1 \quad (4.2.1)$$

onde σ assume os seguintes valores: 0,01, 0,1 e 0,2. Tais valores empregados para o desvio-padrão têm por finalidade considerar níveis de incerteza que tenham contrapartida física para o funcionamento de um motor de combustão interna operando em ciclo Otto. Além disso, os valores escolhidos para o desvio padrão também visam investigar a sensibilidade do modelo.

Como o método de Monte Carlo fornecerá os resultados de referência a fim de verificar os perfis de temperatura e pressão sob incerteza via PCg, necessita-se investigar a convergência dos campos de pressão e temperatura simulados computacionalmente via MC. Para tanto, avalia-se a convergência pelo desvio RMS (*Root Mean Square*) entre uma solução associada a uma amostra suficientemente grande (amostra de tamanho 500.000) e a solução obtida com as seguintes amostras: 10.000, 100.000, 250.000 e 400.000.

Para garantir que o modelo estocástico, proposto nessa seção, encontra-se corretamente solucionado via MC com amostra de tamanho 500.000, comparam-se as curvas de temperatura e pressão sob incerteza com as respectivas curvas determinísticas por meio do desvio RMS. Assim, as Tab. 5.5 e 5.6 apresentam o desvio RMS entre as soluções estocástica e determinística. Por meio dessa análise quantitativa pode-se avaliar a qualidade dos resultados numéricos sujeitos a incerteza com distribuição Gaussiana ou Uniforme, como os três desvios-padrão distintos.

Perante os desvios disponíveis na Tab. 5.5, pode-se verificar que a ordem de grandeza destes equivalem a 10^{-4} , para ambas as grandezas termodinâmicas e para os valores assumidos por σ . Dessa forma, a simulação computacional sob incerteza Gaussiana via MC, com amostra de tamanho 500.000, mostra-se correta. Destaca-se o desvio RMS para a pressão com $\sigma = 0,01$, que atingiu a menor ordem de grandeza, igual a 10^{-5} .

Tabela 5.5 Desvio RMS entre a solução estocástica via MC (500.000) para a distribuição Gaussiana e a solução determinística

	T [°C]	P [MPa]
$\sigma = 0,01$	$7,6578 \times 10^{-5}$	$3,1024 \times 10^{-5}$
$\sigma = 0,1$	$2,8524 \times 10^{-4}$	$1,6740 \times 10^{-4}$
$\sigma = 0,2$	$3,1014 \times 10^{-4}$	$2,2741 \times 10^{-4}$

Resultados semelhantes aos da Tab. 5.5, para o desvio RMS entre as curvas sujeitas à incerteza Uniforme e sem incerteza (determinística), podem ser encontrados na Tab. 5.6. A ordem de grandeza do desvio RMS, de um modo geral, alcançou o valor de 10^{-4} . Como esperado, para um tamanho de amostra fixo, o desvio RMS

aumenta conforma o incremento no desvio-padrão. Tal comportamento foi verificado para as 2 distribuições de probabilidades consideradas.

Tabela 5.6 Desvio RMS entre a solução estocástica via MC (500.000) para a distribuição Uniforme e a solução determinística

	T [°C]	P [MPa]
$\sigma = 0,01$	$7,3341 \times 10^{-5}$	$3,1092 \times 10^{-5}$
$\sigma = 0,1$	$2,7153 \times 10^{-4}$	$1,3856 \times 10^{-4}$
$\sigma = 0,2$	$3,0231 \times 10^{-4}$	$2,2636 \times 10^{-4}$

A investigação realizada nas Tabs. 5.5 e 5.6 permitiram avaliar um dos momentos estocásticos dados pela simulação de Monte Carlo, isto é, a média. Graficamente pode-se investigar a influência do desvio-padrão da variável estocástica X_e (função de Wiebe estocástica) na variância da solução estocástica por meio do Intervalo de Confiança e do Intervalo de Incerteza, para a distribuição Gaussiana e Uniforme, respectivamente.

A Fig. 5.2 mostra a curva pressão simulada via MC, para a amostra de tamanho 500.000 e sob incerteza com distribuição Gaussiana, juntamente com a pressão simulada sem incerteza. Como esperado, a pressão sob incerteza concorda com a pressão determinística. Mais ainda, conforme σ aumenta nota-se que o Intervalo de Confiança se distancia da média e isso se deve ao aumento na variância da pressão. Vale destacar que os Intervalos de Confiança se distinguem a partir do início do processo de combustão. Tal fato se deve a maneira pela qual a incerteza foi considerada na função de Wiebe, dada pela Eq. (4.2.1), onde variável estocástica X_e tem por média $\bar{x} = 0$ para os ângulos que precedem aquele onde ocorre a combustão (Eq. (3.2.3)).

O campo de temperatura sujeito à incerteza obtido pelo método de Monte Carlo, o perfil térmico dos gases no interior da câmara de combustão adiabática via solução determinística e os Intervalos de Confiança podem ser analisados qualitativamente na Fig. 5.3. Analisando os Intervalos de Confiança associados ao aumento do desvio-padrão da variável estocástica, tem-se que a temperatura é mais sensível à propagação de incertezas. Tal observação pode ser apreciada principalmente nas proximidades do valor máximo da temperatura devido à distância entre o valor máximo e mínimo do Intervalo de Confiança.

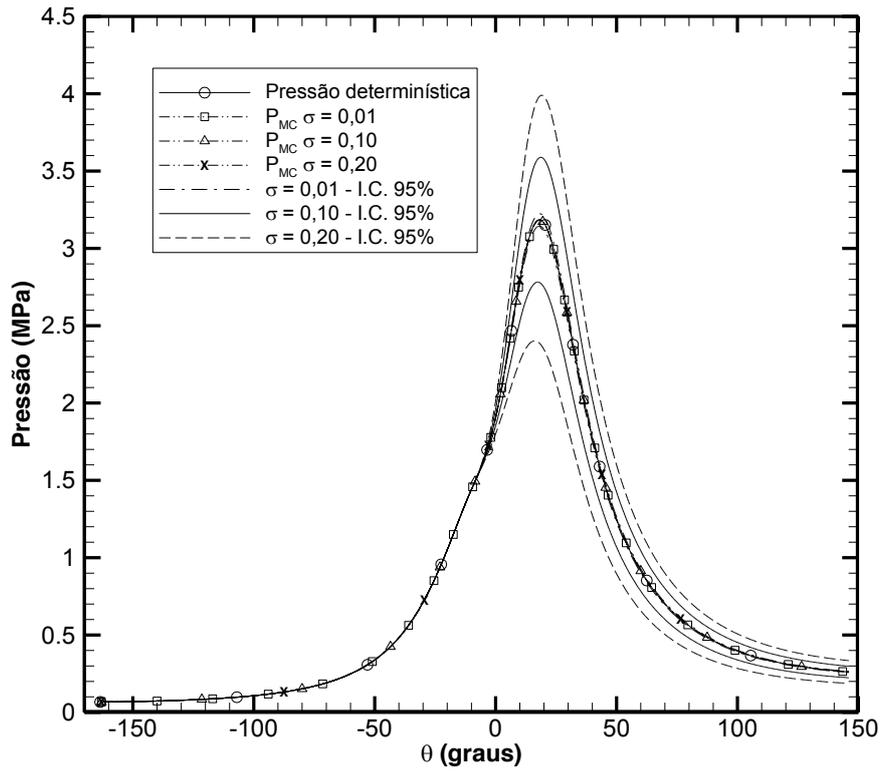


Figura 5.2 Perfil de pressão e I.C. sob incerteza Gaussiana via MC

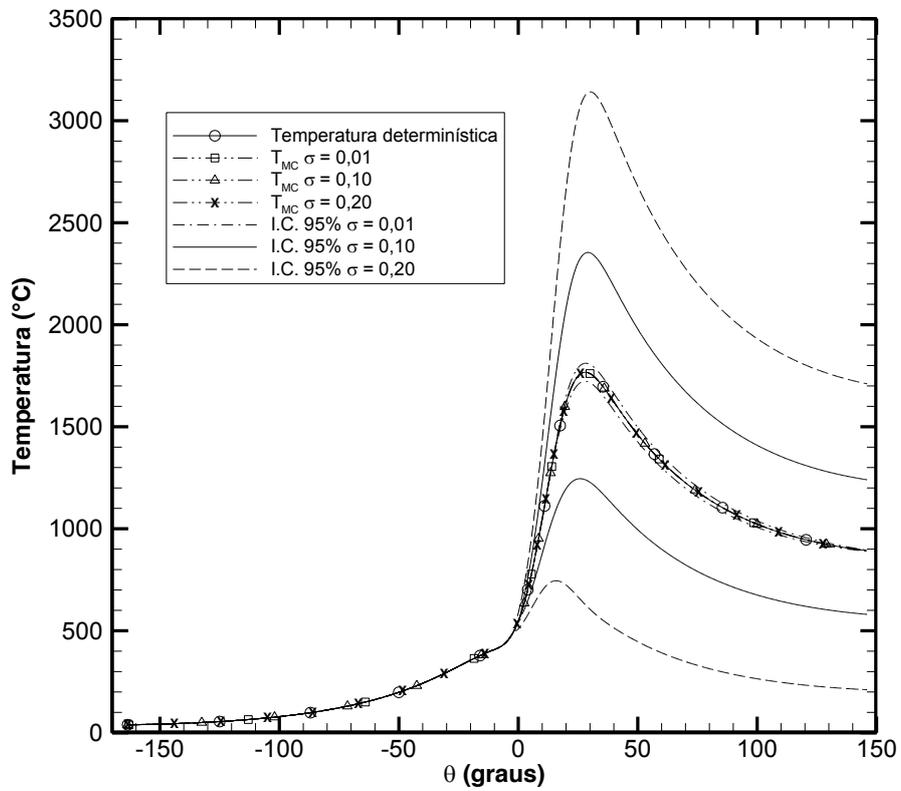


Figura 5.3 Perfil de temperatura e I.C. sob incerteza Gaussiana via MC

A Fig. 5.4 permite o estudo da variância da pressão fornecida pelo MC com amostra de tamanho 500.000, por meio dos Intervalos de Incerteza (I.I.), para os diferentes valores impostos ao desvio-padrão da variável estocástica X_e . Embora o Intervalo de Confiança na Fig. 5.2 e o Intervalo de Incerteza na Fig. 5.4 sejam diferentes, ambos fornecem informações a respeito da variância da pressão em torno da pressão média. Nota-se que os Intervalos de Incerteza apresentam amplitude menor e isso se deve à variável aleatória encontrar-se distribuída uniformemente. Dessa forma, seus valores apresentam menor variação que uma variável aleatória com distribuição Gaussiana, como na Fig. 5.2.

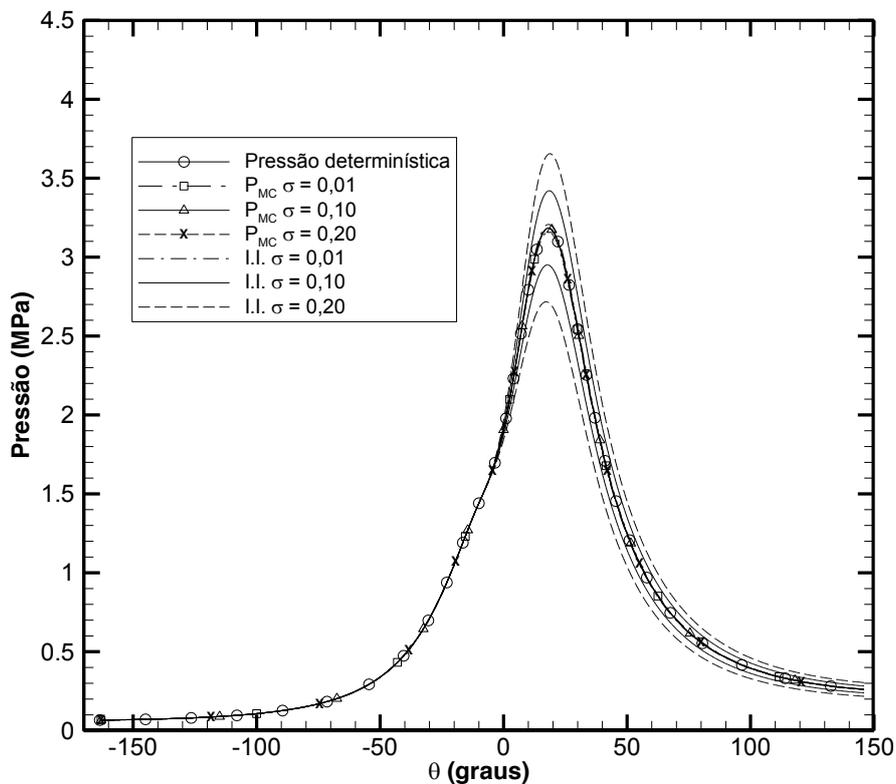


Figura 5.4 Perfil de pressão sob incerteza Uniforme via MC

Os Intervalos de Incerteza associados ao campo de temperatura sujeito à incerteza Uniforme via MC, com amostra de tamanho 500.000, pode ser visto na Fig. 5.5. Tal como analisado na Fig. 5.3, para a amplitude do Intervalo de Confiança, tem-se que o I.C. também apresenta um distanciamento da média considerável, principalmente para $\sigma = 0,2$, porém menor que no caso da distribuição Gaussiana. Essa observação pode ser explicada pelos valores assumidos por uma variável aleatória com distribuição Uniforme, tal como elucidado para a Fig. 5.4.

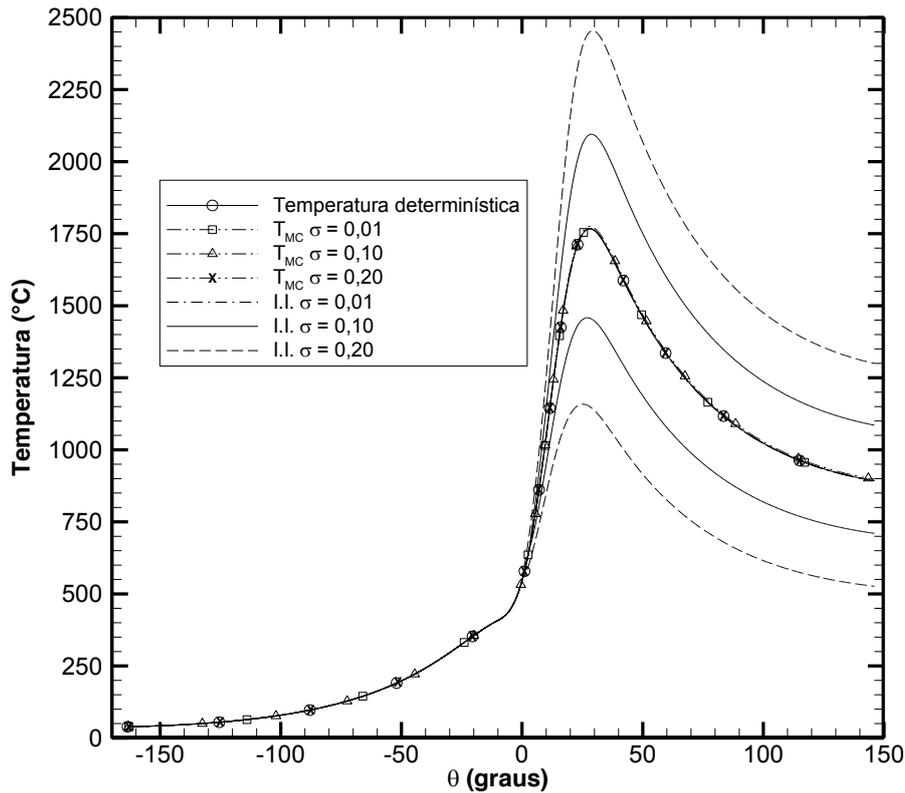


Figura 5.5 Perfil de temperatura sob incerteza Uniforme via MC

A maior amplitude tanto do Intervalo de Confiança quanto do Intervalo de incerteza associados à temperatura se justificam por meio de uma análise do ciclo Otto ideal, que é um processo adiabático, tal como o fenômeno físico no interior do cilindro do motor considerado na presente seção. Assim, considerando um ciclo Otto ideal, tem-se a seguinte relação entre temperatura e pressão para os processos de compressão (1-2), combustão (2-3) e expansão (3-4) (Heywood, 1988),

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{p_3}{p_4} = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} = \left(\frac{T_3}{T_4}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma-1}} \quad (5.2.1.1)$$

onde γ é a razão entre calores específicos e o subscrito indica os seguintes estados termodinâmicos: 1 – início da compressão, 2 – término da compressão e início da combustão, 3 – término da combustão e início da expansão e 4 – término da expansão. Note que na Eq. (5.2.1.4) tem-se que γ é positivo e, por isso, a razão $\frac{\gamma}{\gamma-1} > 1$. Dessa forma, amplifica-se a incerteza para a temperatura.

Com a verificação da solução estocástica via simulação de Monte Carlo para uma amostra de tamanho 500.000, torna-se interessante investigar a convergência

dessa técnica amostral, a fim de reduzir o esforço computacional, pois o tempo de processamento foi de 20 horas e 12 minutos.

Encontra-se disponível na Tab 5.7 a análise da convergência da solução estocástica via simulação de Monte Carlo para a variável estocástica com distribuição Gaussiana, perante os desvios RMS. Nota-se que a temperatura é mais sensível às incertezas que a pressão, pois a convergência do campo de temperatura é mais lenta. Percebe-se que a convergência tanto para o perfil de pressão dos gases no interior do cilindro quanto a convergência da temperatura dos gases durante o funcionamento do motor Otto depende do tamanho da amostra, bem como o desvio-padrão adotado. Em outras palavras, a medida que se aumenta o tamanho da amostra, mais precisa é a solução, e ainda, quanto maior o desvio-padrão considerado, mais lenta é a convergência.

Tabela 5.7 Convergência da solução estocástica via MC para distribuição Gaussiana

		$\sigma = 0,01$		$\sigma = 0,1$		$\sigma = 0,2$	
		T [°C]	P [MPa]	T [°C]	P [MPa]	T [°C]	P [MPa]
Amostra	10.000	2,5861 $\times 10^{-1}$	4,8609 $\times 10^{-4}$	4,3622 $\times 10^{-1}$	4,8642 $\times 10^{-4}$	4,8543 $\times 10^{-1}$	4,8686 $\times 10^{-4}$
	100.000	2,2137 $\times 10^{-3}$	3,1452 $\times 10^{-4}$	3,9364 $\times 10^{-3}$	3,1484 $\times 10^{-4}$	4,7249 $\times 10^{-3}$	3,1491 $\times 10^{-4}$
	250.000	3,2054 $\times 10^{-4}$	1,4329 $\times 10^{-4}$	3,5013 $\times 10^{-4}$	2,4329 $\times 10^{-4}$	3,6511 $\times 10^{-4}$	2,5321 $\times 10^{-4}$
	400.000	7,6818 $\times 10^{-5}$	3,1027 $\times 10^{-5}$	2,8145 $\times 10^{-4}$	1,6781 $\times 10^{-4}$	3,1477 $\times 10^{-4}$	2,2831 $\times 10^{-4}$

A mesma análise de convergência da solução estocástica sujeita a incerteza com distribuição Uniforme, dada pela simulação de Monte Carlo está apresentada na Tab 5.8. Perante os desvios RMS presentes em na tabela, verifica-se uma influência maior da incerteza sobre o perfil de temperatura dos gases no interior do cilindro, o que permite afirmar que essa grandeza termodinâmica é mais sensível à incerteza agregada à função de Wiebe.

Pela análise de convergência do método MC, a solução estocástica de referência deve ser obtida com amostra de tamanho 400.000. Portanto, avalia-se a qualidade dos resultados (as curvas médias da pressão e da temperatura) previstos pelo método PCg por meio do desvio RMS (*Root Mean Square*) entre a solução

estocástica (Φ_{MC}) com amostra de tamanho 400.000 e a solução via PCg (Φ_{PCg}), conforme a Eq.(5.2.1.2).

Tabela 5.8 Convergência da solução estocástica via MC para distribuição Uniforme

		$\sigma = 0,01$		$\sigma = 0,1$		$\sigma = 0,2$	
		T [°C]	P [MPa]	T [°C]	P [MPa]	T [°C]	P [MPa]
Amostra	10.000	2,4641 $\times 10^{-1}$	4,8609 $\times 10^{-4}$	6,2721 $\times 10^{-1}$	4,8615 $\times 10^{-4}$	7,2526 $\times 10^{-1}$	4,8637 $\times 10^{-4}$
	100.000	1,9539 $\times 10^{-2}$	3,1452 $\times 10^{-4}$	4,1411 $\times 10^{-2}$	3,1578 $\times 10^{-4}$	6,3002 $\times 10^{-2}$	3,1759 $\times 10^{-4}$
	250.000	1,6342 $\times 10^{-4}$	1,4330 $\times 10^{-4}$	3,2721 $\times 10^{-4}$	1,5234 $\times 10^{-4}$	4,2404 $\times 10^{-4}$	2,6332 $\times 10^{-4}$
	400.000	7,3252 $\times 10^{-5}$	3,1098 $\times 10^{-5}$	2,7769 $\times 10^{-4}$	1,3882 $\times 10^{-4}$	3,0147 $\times 10^{-4}$	2,2672 $\times 10^{-4}$

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{J} \sum_{i=1}^J (\Phi_{MC} - \Phi_{PCg})^2} \quad (5.2.1.2)$$

onde J representa a quantidade de ângulos ao discretizar o intervalo entre o ângulo de fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de descarga.

Pela Tab. 4.1 o método PCg usa o polinômio de Hermite para distribuição Gaussiana e o polinômio de Legendre para distribuição Uniforme. Estes polinômios estão expostos na Tab. 5.9 até o grau 3.

Tabela 5.9 Polinômio mônico de Hermite e Legendre

Grau	Hermite	Legendre
0	1	1
1	ξ	ξ
2	$\xi^2 - 1$	$\xi^2 - \frac{1}{3}$
3	$\xi^3 - 3\xi$	$\xi^3 - \frac{3}{5}\xi$

Note na Tab. 5.9 que os polinômios são mônicos (coeficiente unitário na variável de maior grau) e são obtidos pelo software Mathematica[®] por meio dos comandos,

$$\frac{\text{HermiteH}\left[j - 1, \frac{\xi}{\sqrt{2}}\right]}{\text{Last}\left[\text{CoefficientList}\left[\text{HermiteH}\left[j - 1, \frac{\xi}{\sqrt{2}}\right], \xi\right]\right]} \quad (5.2.1.3)$$

$$\frac{\text{LegendreP}[j - 1, \xi]}{\text{Last}[\text{CoefficientList}[\text{LegendreP}[j - 1, \xi], \xi]} \quad (5.2.1.4)$$

onde j indica o grau do polinômio. Estes polinômios também podem ser obtidos por fórmula de recorrência ou pela fórmula de Rodriguez (Xiu, 2010).

A Tab. 5.10 exhibe o desvio RMS entre as soluções estocásticas provenientes do método MC com amostra de tamanho 400.000 e do PCg para polinômios ortogonais com grau no máximo (n_p) igual a 3, para o caso em que as incertezas seguem uma distribuição Gaussiana. Os resultados revelam, de uma maneira geral, que o aumento da diferença do desvio RMS está associado ao aumento do desvio-padrão da variável estocástica, independentemente do grau do polinômio utilizado na expansão. No entanto, este aumento mostra-se mais pronunciado para a temperatura cujos desvios possuem ordem de grandeza de 10^{-4} , enquanto os desvios da pressão são da ordem de 10^{-7} .

Tabela 5.10 Desvio RMS entre as soluções estocásticas via MC e PCg para a distribuição Gaussiana

		n_p	
		2	3
T [°C]	$\sigma = 0,01$	$6,4312 \times 10^{-5}$	$6,0213 \times 10^{-5}$
	$\sigma = 0,1$	$6,9672 \times 10^{-5}$	$6,0542 \times 10^{-5}$
	$\sigma = 0,2$	$8,0301 \times 10^{-5}$	$7,8509 \times 10^{-5}$
P [MPa]	$\sigma = 0,01$	$1,4331 \times 10^{-7}$	$1,3982 \times 10^{-7}$
	$\sigma = 0,1$	$1,4342 \times 10^{-7}$	$1,3993 \times 10^{-7}$
	$\sigma = 0,2$	$1,9581 \times 10^{-7}$	$1,8502 \times 10^{-7}$

A verificação das grandezas termodinâmicas T e P, sob incerteza Uniforme, resultantes da aplicação do Polinômio de Caos generalizado ao modelo estocástico, estão disponíveis na Tab. 5.11. O comportamento do desvio RMS entre as soluções dadas pelos métodos amostral e não-amostral é semelhante à distribuição Gaussiana.

A ordem de grandeza dos valores do desvio RMS não varia significativamente com o aumento do desvio-padrão, mas com a variável de interesse. Em outras palavras, para os polinômios ortogonais empregados, o método PCg determina a convergência da pressão mais rapidamente. Mais ainda, no confronto das médias via MC e PCg com $n_p = 2$, considerando o desvio-padrão igual 0,20, o desvio RMS apresentou seu maior valor, sendo este aproximadamente igual a 0,00007 para a temperatura e igual a 0,0000001 para a pressão.

Tabela 5.11 Desvio RMS entre as soluções estocásticas via MC e PCg para a distribuição Uniforme

		n_p	
		2	3
T [°C]	$\sigma = 0,01$	$6,0212 \times 10^{-5}$	$2,0933 \times 10^{-5}$
	$\sigma = 0,1$	$6,4400 \times 10^{-5}$	$3,0400 \times 10^{-5}$
	$\sigma = 0,2$	$7,0374 \times 10^{-5}$	$3,4362 \times 10^{-5}$
P [MPa]	$\sigma = 0,01$	$1,2858 \times 10^{-7}$	$1,0245 \times 10^{-7}$
	$\sigma = 0,1$	$1,3978 \times 10^{-7}$	$1,1787 \times 10^{-7}$
	$\sigma = 0,2$	$1,5589 \times 10^{-7}$	$1,3521 \times 10^{-7}$

Pelas Tabs. 5.10 e 5.11 foram avaliadas as soluções estocásticas por meio da técnica PCg para ambas as distribuições e, pela análise dos desvios RMS, torna-se possível afirmar que uma base de polinômios ortogonais com grau máximo igual a 3, garante os melhores resultados. Mais ainda, a diminuição no grau do Polinômio de Caos utilizado na expansão, de 3 para 2, acarretou em um crescimento na ordem de grandeza dos desvios RMS obtidos. Tal fato justifica-se pela relação que existe entre a quantidade de termos na expansão espectral e o grau do polinômio, conforme a Eq. (4.2.1.8).

A análise quantitativa da implementação da técnica não-amostrai Polinômio de Caos generalizado objetivou avaliar a qualidade das curvas médias da pressão e da temperatura, porém não permite investigar o impacto das incertezas nos Intervalos de Confiança (distribuição Gaussiana) e de Incerteza (distribuição Uniforme). Em um contexto estocástico, verificar tais intervalos viabiliza relacionar o desvio-padrão da variável estocástica, à variância da pressão e da temperatura.

A Fig. 5.6 exibe o confronto entre a pressão simulada computacionalmente via Polinômio de Caos generalizado com $n_p = 3$ e por meio da simulação de Monte Carlo com amostra de tamanho 400.000. Também estão expostos os Intervalos de

Confiança no nível 95% determinado pelas técnicas de quantificação de incertezas para cada desvio-padrão. Observa-se a concordância dos Intervalos de Confiança fornecidos pelos métodos MC e PCg para os 3 desvios-padrão considerados. Outra análise importante que pode ser realizada pelo presente gráfico, diz respeito à variabilidade da solução estocástica para um desvio-padrão específico. Nota-se que a variância da pressão apresenta maior variabilidade quando se adota $\sigma = 0,2$ na variável estocástica X_e .

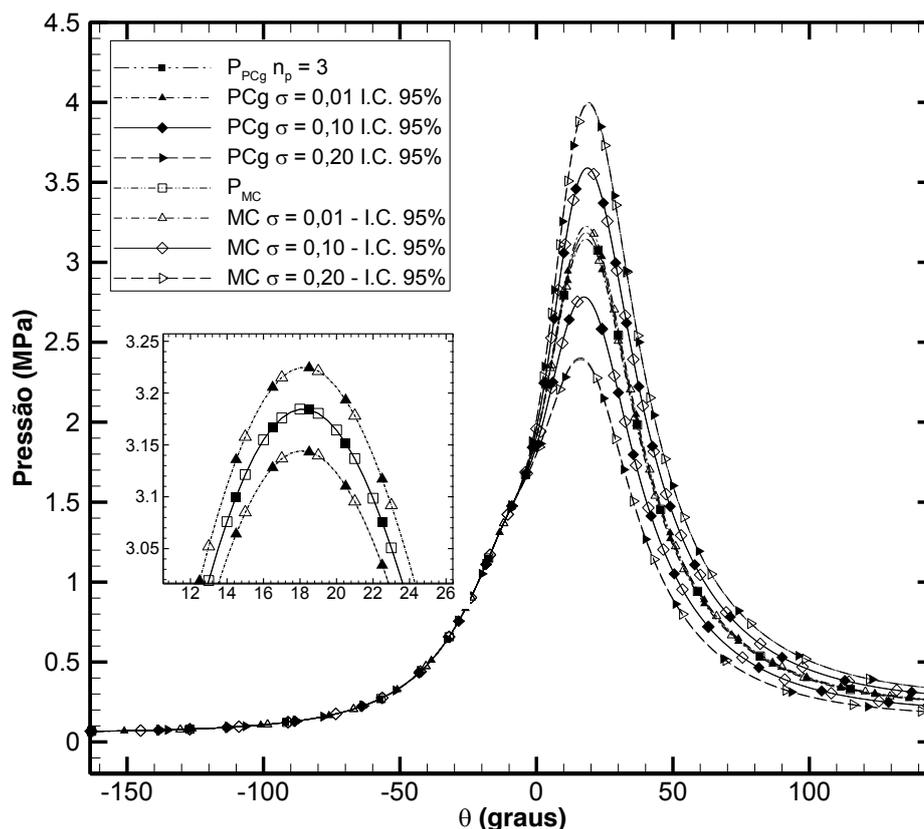


Figura 5.6 Comparação entre PCg e MC para a pressão com distribuição Gaussiana

Em relação à variabilidade, a pressão mostra-se menos sensível à incerteza Gaussiana que a temperatura, como se verifica na Fig. 5.7. Além disso, os Intervalos de Confiança associados à simulação de Monte Carlo e ao método PCg se mostram concordantes para os desvios-padrão iguais a 0,01, 0,10 e 0,20. Para o maior valor atribuído ao desvio-padrão, tem-se o estimador intervalar com elevada amplitude a partir do pico de pressão. Também se observa que os limites dos Intervalos de Confiança tendem a uma distância assintótica em relação à temperatura média.

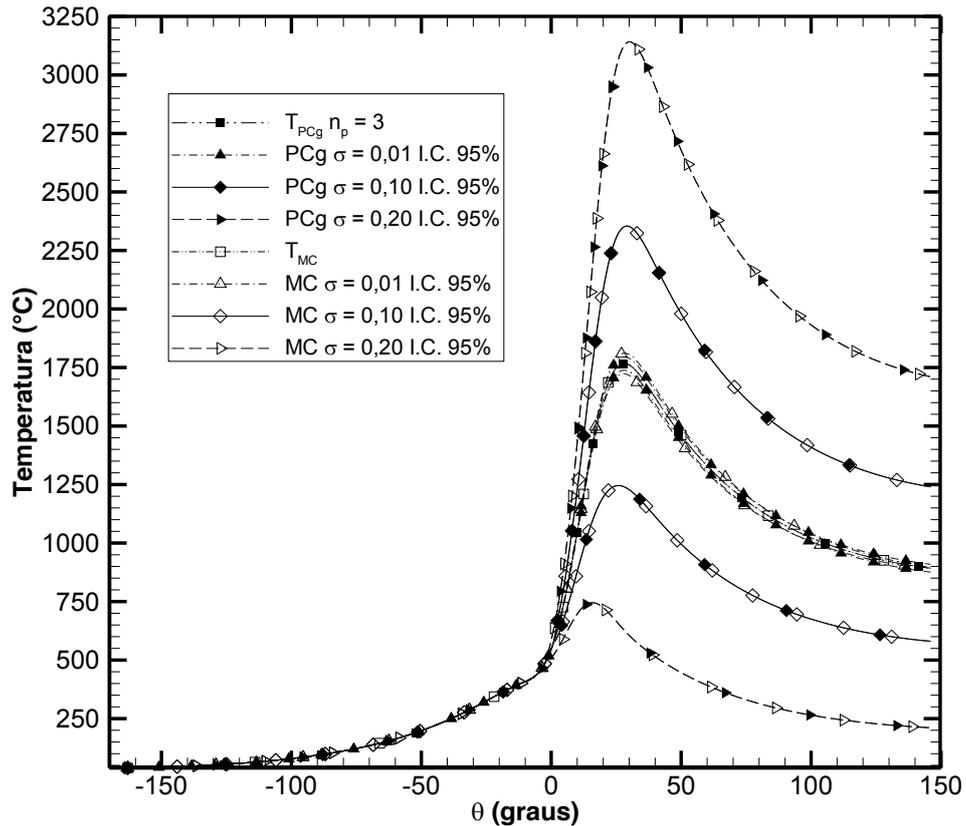


Figura 5.7 Comparação entre PCg e MC para a temperatura com distribuição Gaussiana

Analogamente para a distribuição Uniforme, expõem-se os momentos estocásticos da pressão ao longo do eixo de manivelas na Fig. 5.8. Embora o Intervalo de Incerteza seja diferente do Intervalo de Confiança, ambos fornecem informação a respeito da variância. Assim, incrementar o desvio-padrão da fração mássica de combustível queimado com incerteza, Eq. (4.2.1), gera Intervalos de Incerteza com amplitudes menores e isso decorre da variável estocástica ξ assumir valores no intervalo $[-1,1]$. Em contrapartida, quando ξ segue uma distribuição Gaussiana, a mesma varia no intervalo $(-\infty, \infty)$.

A Fig. 5.9 mostra o perfil de temperatura no interior do cilindro resultante da solução do modelo estocástico pela aplicação da simulação de Monte Carlo de referência e do Polinômio de Caos generalizado com $n_p = 3$, para a distribuição Uniforme. Vale destacar que os limites dos Intervalos de Incerteza, para todos os desvios-padrão usados, possuem amplitude menor que aquele associado à distribuição Gaussiana (Fig. 5.7) e a justificativa desse fato encontra-se no parágrafo anterior. Se faz mister salientar a concordância entre os Intervalos de Incerteza associados à técnica amostral e a não-amostral.

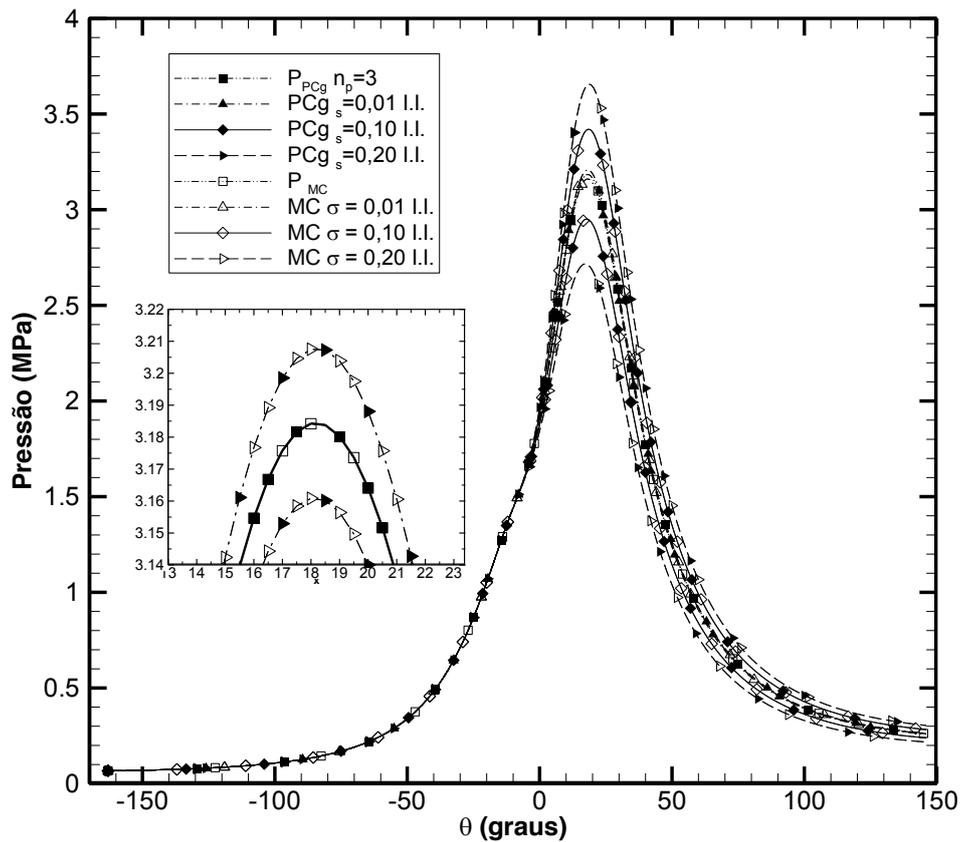


Figura 5.8 Comparação entre PCg e MC para a pressão com distribuição Uniforme

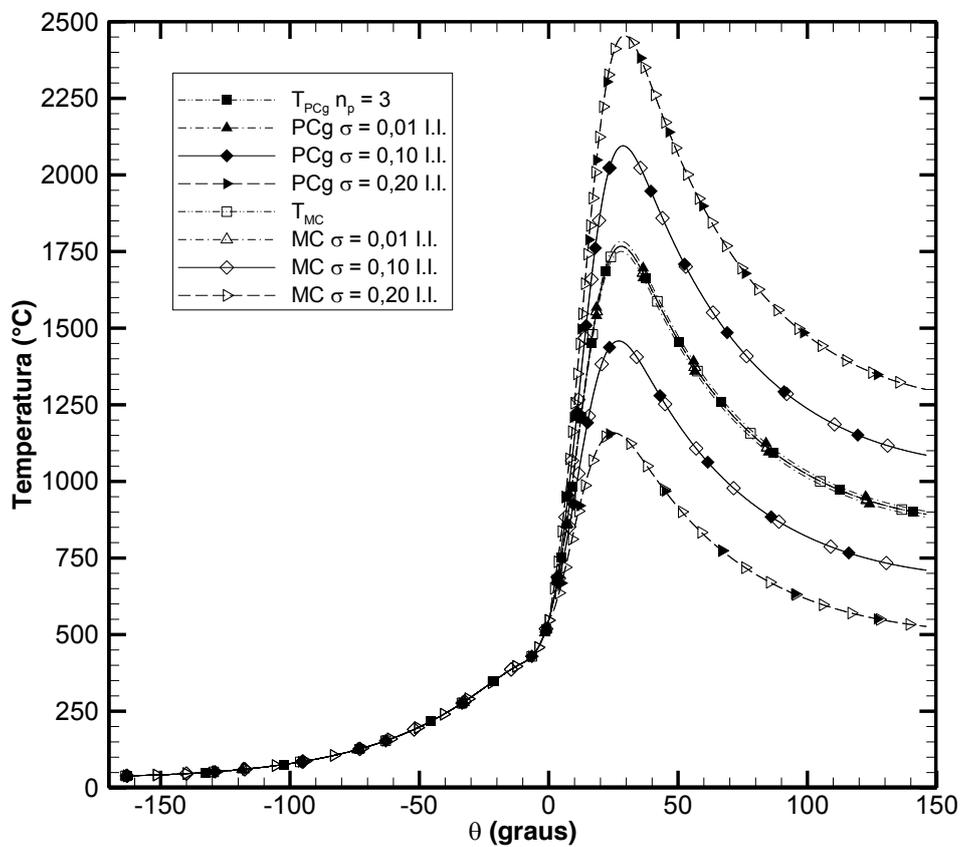


Figura 5.9 Comparação entre PCg e MC para a temperatura com distribuição Uniforme

O estudo da variância foi realizado por meio dos Intervalos de Confiança (Fig. 5.6 e 5.7) e de Incerteza (Fig. 5.8 e 5.9), cujo objetivo foi avaliar a variabilidade dos valores de temperatura e pressão a cada ângulo do eixo de manivelas. Além disso, serviu para estudar a influência da incerteza na fração mássica de combustível queimado nos perfis térmicos e da pressão. Observou-se que inserir a incerteza na Equação de Wiebe, que representa a liberação de energia para o sistema a partir da queima do combustível, influenciou significativamente o comportamento do campo de temperatura no interior da câmara de combustão.

Um aspecto importante a ser comparado entre uma técnica amostral e uma não-amostral reside no custo computacional necessário para alcançar a solução desejada. Portanto, a Tab. 5.12 exhibe o tempo de processamento necessário para obter a solução estocástica via PCg e a Tab. 5.13 expõe o esforço computacional exigido pelo MC, que tipicamente apresenta elevado tempo computacional.

Convém ressaltar que o tempo de processamento do PCg encontra-se intrinsecamente relacionado ao grau do polinômio adotado, visto que o maior grau do polinômio implica em um maior sistema de equações a ser resolvido, como pode ser observado na Tab. 5.12 para a distribuição Gaussiana. Vale salientar que em todos os casos estudados, o método PCg apresentou baixo tempo de processamento, sendo o maior destes equivalente a 0,3 segundo. Por outro lado, como esperado, o método de Monte Carlo necessitou de 6 horas e 45 minutos para concluir a simulação com amostra de tamanho 400.000 com $\sigma = 0,2$.

Tabela 5.12 Tempo computacional (s) do PCg para a distribuição Gaussiana

	n_p	
	2	3
$\sigma = 0,01$	0,11	0,31
$\sigma = 0,1$	0,11	0,34
$\sigma = 0,2$	0,14	0,38

Tabela 5.13 Tempo computacional (min) do MC para a distribuição Gaussiana

		$\sigma = 0,01$	$\sigma = 0,1$	$\sigma = 0,2$
Amostra	10.000	10,07	11,31	11,81
	100.000	99,52	114,52	117,85
	250.000	252,30	298,21	304,32
	400.000	337,92	395,83	404,71

A Tab. 5.14 apresenta o tempo computacional necessário para o método PCg solucionar o modelo estocástico com distribuição Uniforme. Observam-se os mesmos

valores da Tab. 5.12. Dessa maneira, a distribuição de probabilidade não interfere no tempo de processamento.

Tabela 5.14 Tempo computacional (s) do PCg para a distribuição Uniforme

	n_p	
	2	3
$\sigma = 0,01$	0,11	0,31
$\sigma = 0,1$	0,11	0,34
$\sigma = 0,2$	0,14	0,38

O esforço computacional realizado pela técnica MC a fim de simular computacionalmente o funcionamento de um motor operando em ciclo Otto e abastecido com etanol encontra-se na Tab. 5.15. Os minutos gastos para cada caso estudado são praticamente os mesmos vistos na Tab. 5.13, isto é, independe da distribuição de probabilidade. Vale frisar que os tempos diferem nos segundos.

Tabela 5.15 Tempo computacional (min) do MC para a distribuição Uniforme

		$\sigma = 0,01$	$\sigma = 0,1$	$\sigma = 0,2$
Amostra	10.000	10,07	11,43	11,72
	100.000	99,83	114,62	117,75
	250.000	252,18	298,41	303,99
	400.000	337,81	395,83	403,67

De um modo geral, confrontando os tempos computacionais associados ao método de Monte Carlo e ao método de Polinômio de Caos, torna-se notória a vantagem da técnica não-amstral, pois com meio segundo de processamento se conseguiu solucionar o modelo estocástico, em contraste aos 403 minutos gastos pelo método de Monte Carlo com amostra de tamanho 400.000.

5.2.2. Propagação de incertezas via MCE

Esta subseção compreende os resultados relativos à quantificação das incertezas na simulação computacional do funcionamento do motor descrito na introdução dessa seção.

Inicialmente será realizada uma comparação entre os métodos MCE e PCg. Portanto, será realizada a simulação sob incertezas do motor operando no ciclo Otto e

considerando a câmara de combustão adiabática, tal como na subsecção 5.2.1. A comparação dos resultados provenientes da aplicação do método de Colocação Estocástica e da técnica PCg está na Fig. 5.10.

A curva de pressão determinada pelo MCE empregou nível 1 para a malha esparsa e o método de Polinômio de Caos generalizado usou uma base de polinômios ortogonais com grau máximo igual a 3. Pela Fig. 5.10 nota-se que ambos os métodos determinaram o mesmo Intervalo de Incerteza, bem como a mesma curva média da pressão no interior do cilindro.

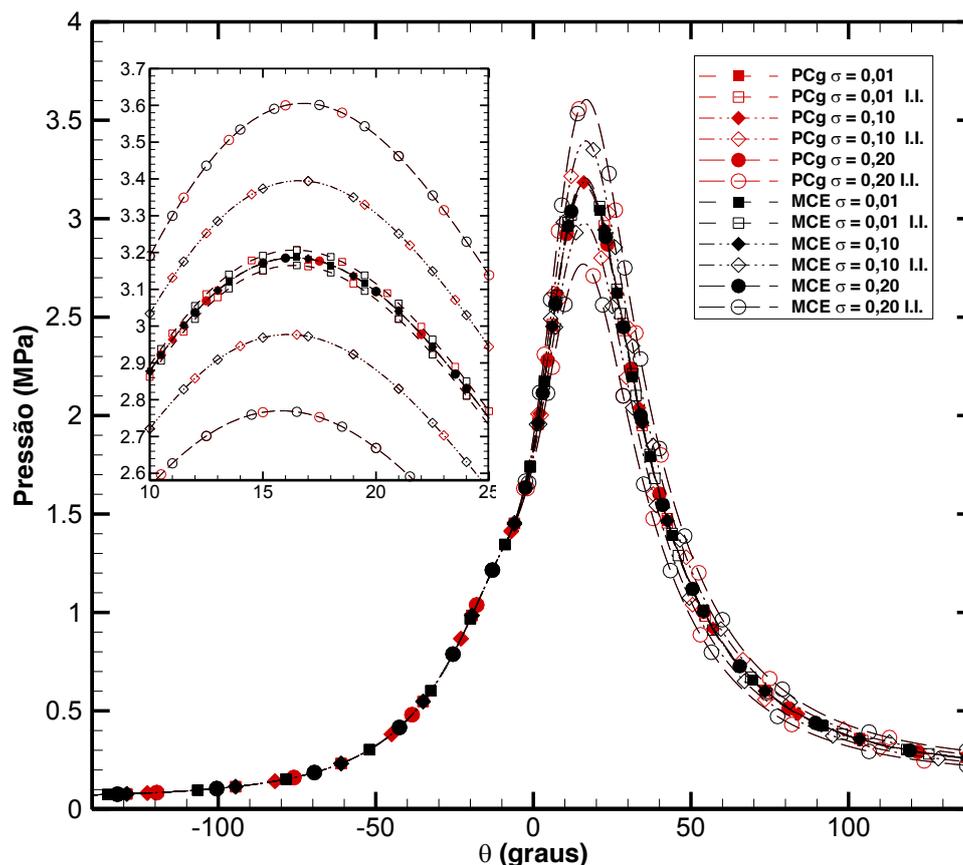


Figura 5.10 Comparação entre PCg e MCE para o caso $h = 0$

Calculou-se a diferença relativa entre o Intervalo de Incerteza superior e a média da pressão (\bar{P}), cujos resultados estão na Tab. 5.16, a fim de quantificar a influência dos desvios-padrão empregados (0,01; 0,10 e 0,20) para a variável estocástica (Eq. 4.2.1). Vale frisar que foi considerado o caso em que a variável estocástica segue uma distribuição de probabilidade Uniforme para comparação dos métodos, pois a malha esparsa usada no MCE emprega pontos de colocação que são adequados a esse tipo de distribuição.

Sendo o desvio-padrão (σ) um dado de entrada no código computacional e a diferença relativa obtida pelos dados de saída (momentos estocásticos da pressão),

tem-se que a razão entre estas grandezas mostrou-se constantes, conforme Tab. 5.16. Assim, a incerteza na correlação de Wiebe influenciou a pressão de forma linear.

Tabela 5.16 Diferença relativa entre MCE e PCg para o caso h=0

	$\frac{ P_{I.I.} - \bar{P} }{\bar{P}} 100\%$	$\left(\frac{ P_{I.I.} - \bar{P} }{\bar{P}} 100\%\right) \times \frac{1}{\sigma}$
$\sigma = 0,01$	0,66 %	65,7
$\sigma = 0,1$	6,57 %	65,7
$\sigma = 0,2$	13,15 %	65,7

A Tab. 5.17 exhibe o tempo computacional de cada método de propagação de incertezas conforme o desvio-padrão. Pelo esforço computacional, nota-se que aumenta o desvio-padrão da variável estocástica não aumentou o intervalo de tempo de forma significativa. Ambos os métodos apresentam baixo esforço computacional, sendo para o MCE necessários 3,9 s a mais que o PCg. em media.

Tabela 5.17 Tempo computacional do MCE e do PCg para o caso h=0

	MCE	PCg
$\sigma = 0,01$	4,13	0,31
$\sigma = 0,1$	4,20	0,34
$\sigma = 0,2$	4,36	0,38

Diferentemente da subseção anterior, que considerou somente o caso da câmara de combustão adiabática, será contabilizada a troca de calor entre os gases e as paredes da câmara de combustão.

Vale frisar que todos os dados de entrada para a simulação computacional, bem como as informações do motor estão dispostas nas Tab. 5.1-4.

No contexto estocástico, a simulação de Monte Carlo é adotada como uma técnica de referência e, por isso, a verificação do Método de Colocação Estocástica decorrerá da comparação com os resultados obtidos pelas duas técnicas. Além disso, pelo estudo realizado na subseção 5.2.1 acerca da convergência do método MC, será utilizada amostra de tamanho 400.000 para obter as curvas de pressão e temperatura de referência. Mais ainda, o esforço computacional de ambas as técnicas de quantificação de incertezas serão comparadas.

A fim de considerar incertezas nos parâmetros ou funções, foram escolhidas as seguintes variáveis:

- coeficientes ajustáveis a_w e m_w da função de Wiebe (Eq. (3.2.3));
- função de Wiebe (x) (Eq. (3.2.3));
- razão entre calores específicos (γ);
- correlação de Woschni (h) (Eq. (3.3.5)).

A partir da combinação das variáveis com incerteza determinou-se 5 modelos estocásticos, descritos na subsecção 4.2.2 com as respectivas motivações para a inclusão da incerteza. Os modelos estocásticos foram propostos seguindo uma ordem crescente para a dimensão estocástica, também com o intuito de estudar o impacto da propagação das incertezas nos momentos estocásticos.

Os parâmetros e/ou funções com incerteza, para cada modelo estocástico estão distribuídos com a mesma probabilidade em torno da média, isto é, seguem uma distribuição de probabilidade uniforme. Assim, o valor médio da variável estocástica encontra-se no meio do intervalo e os limites do intervalo estão à mesma distância do valor médio. A escolha dessa distribuição de probabilidade se deve ao não conhecimento das distribuições das incertezas para as variáveis escolhidas.

Para determinar o desvio-padrão a ser usado para cada variável estocástica, necessita-se estabelecer um valor para a média da variável estocástica, bem como os limites do intervalo de distribuição. Encontra-se o desvio-padrão pela diferença relativa média entre o limite do intervalo e a média (σ) dada por,

$$\sigma = \frac{b-m}{m} \quad (5.2.2.1)$$

onde m é a média do intervalo $[a, b]$, isto é, $m = 0,5(a + b)$ tal que $a, b \in \mathbb{R}$.

Segundo Melo (2007), a razão entre calores específicos (γ) dos reagentes em função da temperatura, para o motor simulado computacionalmente nessa subsecção e abastecido com etanol, varia no intervalo $[1,22; 1,40]$. Portanto, a razão entre calores específicos com incerteza (γ_e) tem por média ($\bar{\gamma}$) valor igual a 1,31. Logo, o desvio-padrão de γ_e , calculado pela Eq. (5.2.2.1), equivale a 0,07.

Os coeficientes ajustáveis a_w e m_w da função de Wiebe, empregam tipicamente os respectivos valores, 5 e 2. Assim, os valores médios das variáveis estocásticas a_{w_e} e m_{w_e} serão 5 e 2, respectivamente. Os intervalos para distribuição uniforme serão $[4,6]$ para a_{w_e} e $[1,3]$ para m_{w_e} , pois ambos conferem às variáveis estocásticas valores factíveis conforme a literatura (Tadeu, 2007).

Ainda tratando da inclusão de incerteza na função de Wiebe, de uma forma diferente do que foi descrito no parágrafo anterior, toma-se $x(\theta)$ por média com desvio-padrão igual a 0,10, como considerado na subsecção 5.2.1 pela Eq. (4.2.1),

$$X_e(\theta, \xi) = \bar{x}(\theta)(1 + \sigma\xi) \quad (4.2.1)$$

onde a variável estocástica X_e se distribui de maneira uniforme em $[\bar{x} - 0,1\bar{x}; \bar{x} + 0,1\bar{x}]$.

Borman e Nishiwaki (1987) disponibilizaram um gráfico com diferentes correlações para o coeficiente de troca de calor convectivo (h) (Pflaum, Annand, Nusselt, Eichelberg e Woschni) para uma mesma condição operacional de um motor de combustão interna operando em ciclo Otto. Pela comparação do maior valor da curva dada pela correlação de Pflaum e a correlação de Woschni, que valem respectivamente, $4415 \text{ W(m}^2\text{K)}^{-1}$ e $2076 \text{ W(m}^2\text{K)}^{-1}$ determinou-se o desvio-padrão igual a 1,13, ao tomar por referência o valor de h para a correlação de Woschni (média). Como a incerteza foi considerada em h , que é uma variável dependente do ângulo do eixo de manivelas, o intervalo onde a variável estocástica h_e se distribui uniformemente descreve-se em termos da média, isto é, $h_e \in [\bar{h} - 1,13\bar{h}; \bar{h} + 1,13\bar{h}]$

Assim, para facilitar a leitura, a Tab. 5.18 apresenta as variáveis estocásticas por **Modelo**, juntamente com os seus respectivos desvios-padrão e intervalo de distribuição Uniforme (última linha da tabela).

O Método de Colocação Estocástica com malha esparsa faz uso de níveis, onde cada nível é composto por uma determinada quantidade de pontos de colocação. Na subseção 4.2.2 descreveu-se o algoritmo de Smolyak que determina os pontos de colocação a fim de ter uma malha esparsa. A Tab. 5.19 expõe a quantidade de pontos de colocação a cada nível considerando o aumento da dimensão do espaço estocástico.

Tabela 5.18 Desvio-padrão (σ) das variáveis estocásticas

		Parâmetro com incerteza			Função com incerteza	
		a_{w_e}	m_{w_e}	γ_e	h_e	X_e
Modelo	1	-	-	0,07	-	
	2	-	-	-	1,13	0,10
	3	-	-	0,07	1,13	0,10
	4	0,20	0,50	0,07	-	-
	5	0,20	0,50	0,07	1,13	-
		[1,3]	[4,6]	[1,22; 1,40]	$[\bar{h} - 1,13\bar{h}; \bar{h} + 1,13\bar{h}]$	$[\bar{x} - 0,1\bar{x}; \bar{x} + 0,1\bar{x}]$.

Tabela 5.19 Quantidade de pontos de colocação por nível

Nível		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Dimensão Estocástica	1	3	5	9	17	33	65	129	257	513	1025
	2	5	13	29	65	145	321	705	1537	3329	7169
	3	7	25	69	177	441	1073	2561	6017	13953	32001
	4	9	41	137	401	1105	2929	7537	18945	46721	113409

Antes de verificar o código computacional elaborado para implementar o Método de Colocação Estocástica pelo confronto com os resultados da simulação de Monte Carlo, torna-se necessário investigar a convergência da solução estocástica fornecida pelo MCE. Dessa forma, a convergência da solução proveniente do MCE deverá ser avaliada por meio da média e do Intervalo de Incerteza, que é obtido a partir da variância.

O **Modelo 1** possui menor dimensão estocástica, uma vez que é unidimensional. As incertezas foram consideradas no parâmetro γ (razão entre calores específicos). Como pode ser visto na Fig. 5.11 os Intervalos de Incerteza coincidem com 3 pontos de colocação. Note que os Intervalos de Incerteza coincidem para os 3 níveis de interpolação no espaço estocástico unidimensional e, dessa forma, a convergência ocorreu com o primeiro nível.

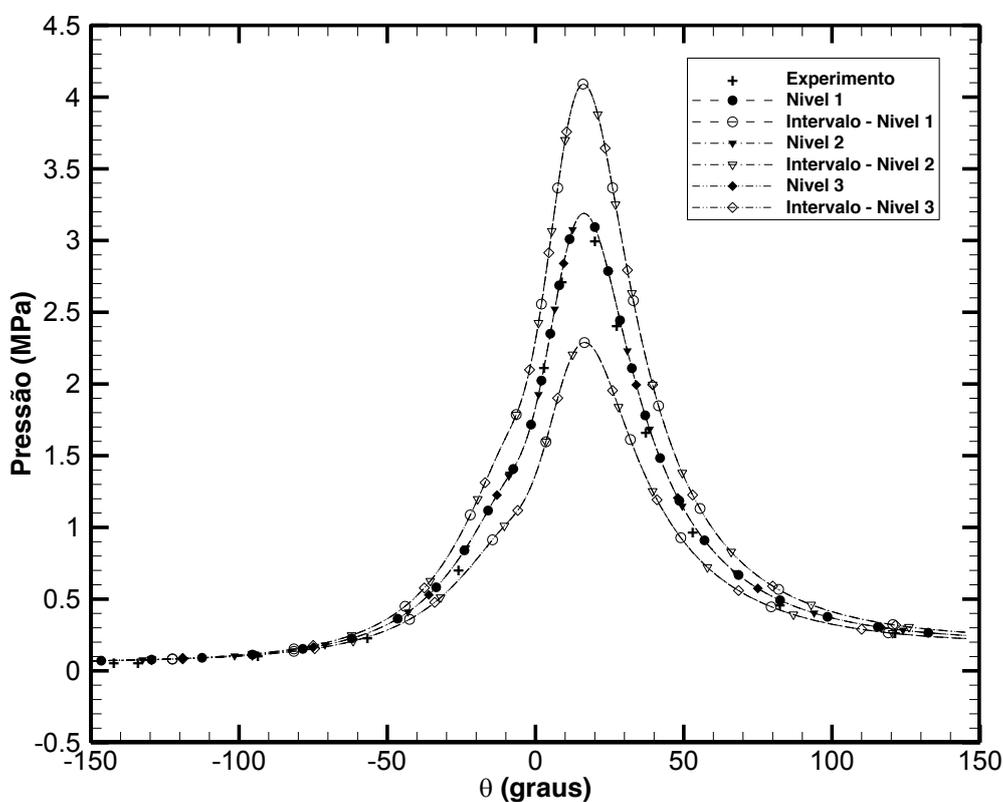


Figura 5.11 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 1

O **Modelo 2** tem a solução estocástica obtida em um espaço estocástico bidimensional por meio do Método de Colocação Estocástica. Esse modelo difere do anterior por ter sido acrescido uma variável estocástica, pois foi considerada incerteza à função de Wiebe. A análise da Fig. 5.12 permite identificar que a propagação das incertezas incluídas em γ e x implicou em Intervalos de Incerteza coincidentes para os níveis 3 e 4. Assim, pela Tab. 5.19 a convergência ocorre com 25 pontos de colocação (nível 3). Também nota-se que o aumento da dimensão estocástica associa-se a uma convergência mais lenta, pois a variável estocástica X_e aumentou a variabilidade da pressão dos gases no interior do cilindro.

Cabe ressaltar a sensibilidade do modelo em relação aos valores da função Wiebe, pois esta modela a energia liberada pela combustão que é fornecida ao sistema. Assim, as quantidades termodinâmicas em estudo, em especial a pressão, sofrem variações em virtude da variabilidade da variável estocástica X_e , a qual se agrega às variações da razão de calores específicos com incerteza no intervalo de distribuição Uniforme [1,22; 1,40]. Logo, espera-se que a convergência do Modelo 2 seja mais lenta que a do Modelo 1, como observado na comparação entre as Fig. 5.11 e Fig. 5.12.

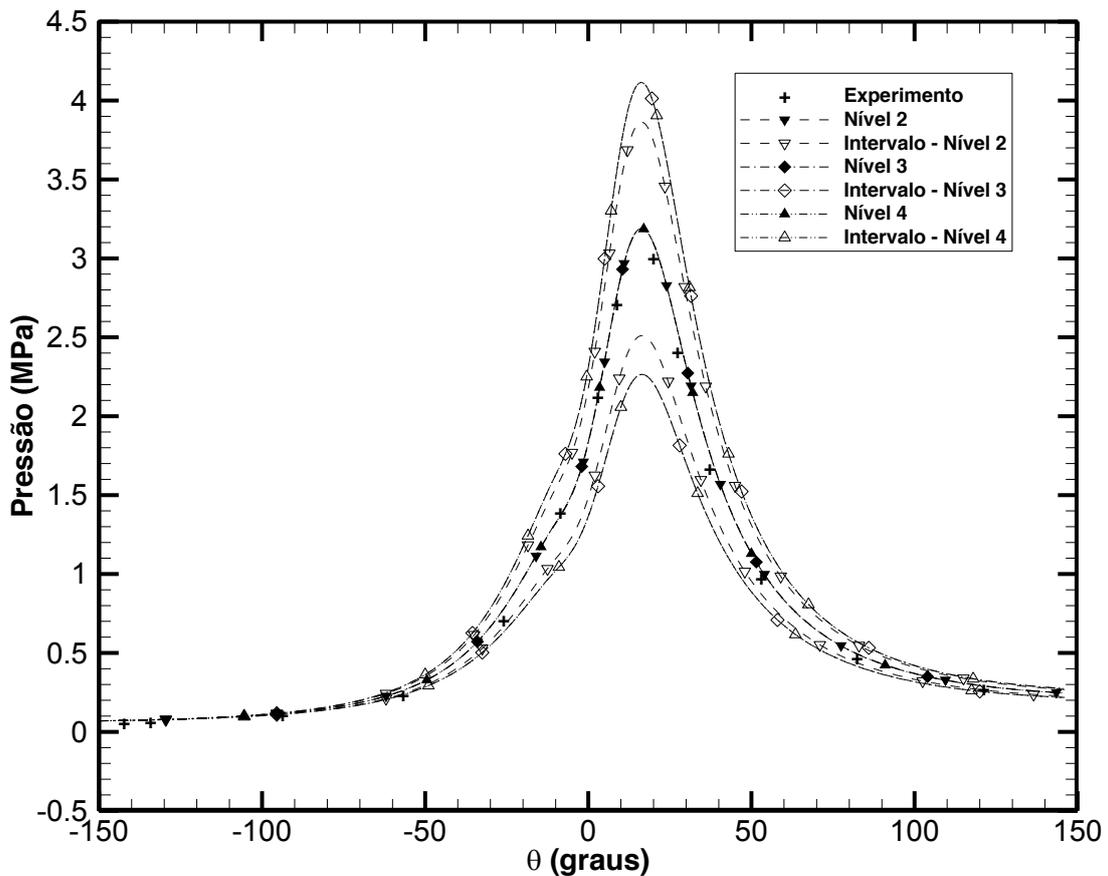


Figura 5.12 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 2

O resultado da aplicação do MCE ao **Modelo 3** é apresentado na Fig. 5.13 para diferentes níveis de interpolação. Vale salientar que o presente modelo empregou as mesmas variáveis estocásticas do Modelo 2 e agregou a inclusão da incerteza no coeficiente de troca de calor por convecção (h). Embora ambos os modelos tenham convergido com malha esparsa de nível 3, deve-se atentar a dimensão estocástica que é diferente. O modelo em análise de convergência possui dimensão estocástica igual a 3 e, pela Tab. 5.19, corresponde a 69 pontos de colocação. Ou seja, aumentar a dimensão estocástica em 1 unidade, aumentou a quantidade de pontos de colocação em 176%.

Perante os resultados da convergência do Modelo 2 e do Modelo 3, ambos os modelos estocásticos convergiram com o mesmo nível de interpolação no espaço estocástico. Esse fato permite analisar a sensibilidade da pressão no interior da câmara de combustão, em relação à variação dos valores do parâmetro h . Por essa análise, se verifica que agregar a incerteza ao coeficiente de transferência de calor, impondo diferentes valores no intervalo $[\bar{h} - 1,13\bar{h}; \bar{h} + 1,13\bar{h}]$, entre o fechamento da válvula de descarga e a abertura da válvula de descarga, não ocasionou variabilidade suficiente no perfil de pressão a ponto de aumentar o nível de interpolação para convergir a solução.

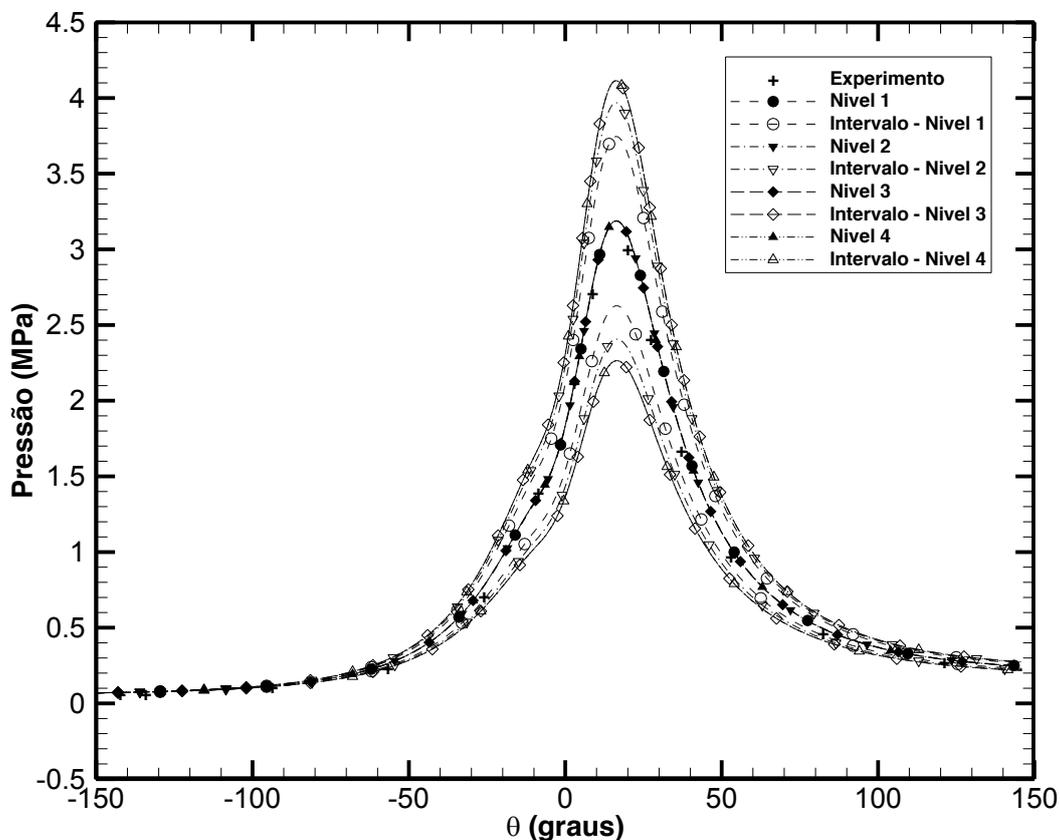


Figura 5.13 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 3

O estudo da convergência da solução estocástica por meio do MCE aplicado ao **Modelo 4** é apresentado na Fig. 5.14. Nota-se que o aumento do nível ocasionou alterações na variância, uma vez que os Intervalos de Incerteza se afastam da média e apresentam o mesmo comportamento a partir do nível 3. Portanto, a solução estocástica a partir do nível 3 encontra-se convergida. Pela Tab. 5.19, a malha esparsa em um espaço estocástico tridimensional e com nível de interpolação igual a 3 resulta em 69 simulações computacionais.

O que difere o Modelo 3 do Modelo 4 é maneira pela qual a incerteza foi considerada na função de Wiebe e por não considerar o coeficiente de troca de calor (h) como variável estocástica. No Modelo 3 a incerteza foi agregada a própria função de Wiebe e no Modelo 4 esta foi inserida em 2 parâmetros da mesma função. Entretanto, como a convergência ocorreu com o mesmo nível de interpolação e mesma quantidade de pontos de colocação (possuem mesma dimensão estocástica), pode-se afirmar que a pressão dos gases no interior do cilindro apresenta mesma sensibilidade para as duas formas de combinar as variáveis estocásticas.

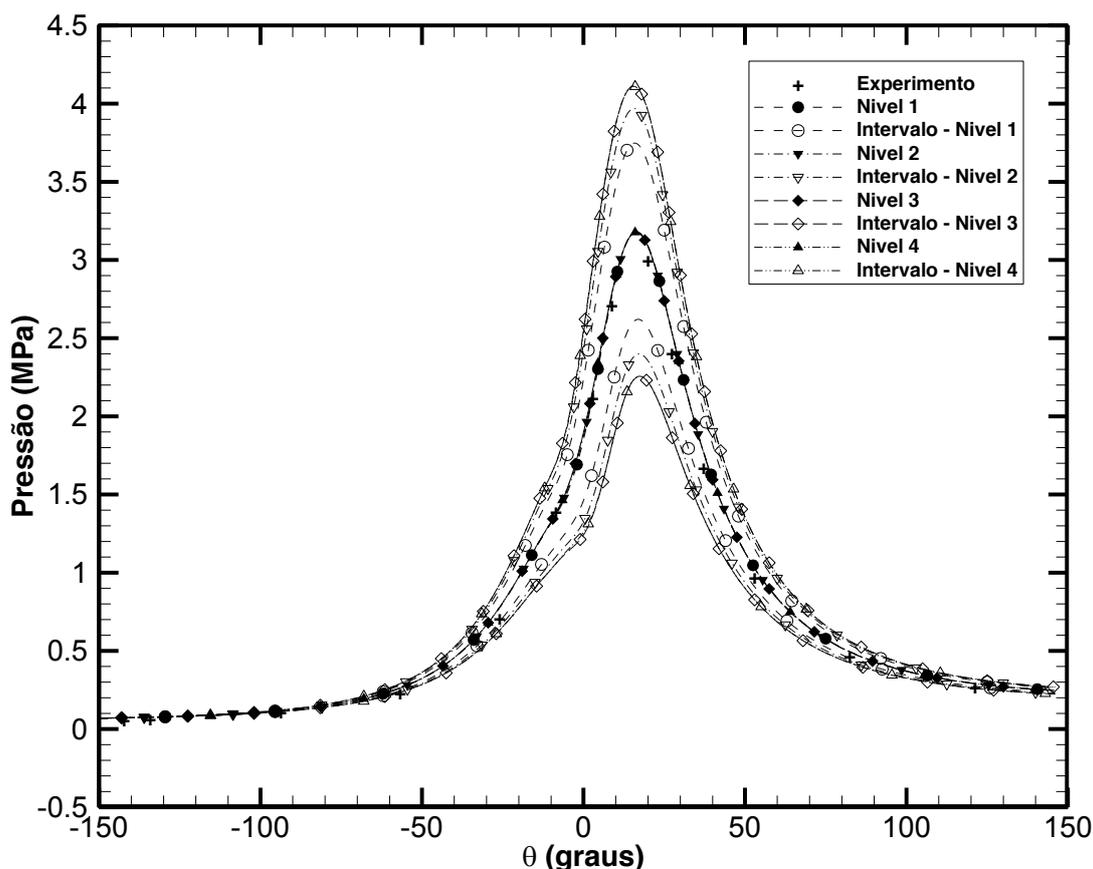


Figura 5.14 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 4

O **Modelo 5** possui dimensão estocástica uma unidade maior que o Modelo 4, pois a esse foi acrescida a variável estocástica h_e e a investigação da convergência da

solução via MCE por meio dos Intervalos de Incerteza está disponível na Fig. 5.15. Percebe-se que o aumento da dimensão estocástica gerou a não convergência para a malha esparsa com nível 3, o que permite dizer que agregar incertezas ao coeficiente de troca de calor convectivo retardou a convergência. Sendo esta atingida com 401 pontos de colocação, que corresponde ao nível 4 para dimensão estocástica igual a 4.

A pressão dos gases no interior do cilindro mostrou maior sensibilidade a combinação das variáveis estocásticas no Modelo 5 em comparação com os demais modelos estocásticos propostos. Pela análise de convergência realizada para aplicação do Método de Colocação Estocástica aos modelos sob incertezas, que buscaram agregar as incertezas de diferentes formas e, conseqüentemente, com dimensões estocásticas distintas, verificou-se que a maneira pela qual as incertezas foram dispostas no modelo gerou maior ou menor variância da pressão.

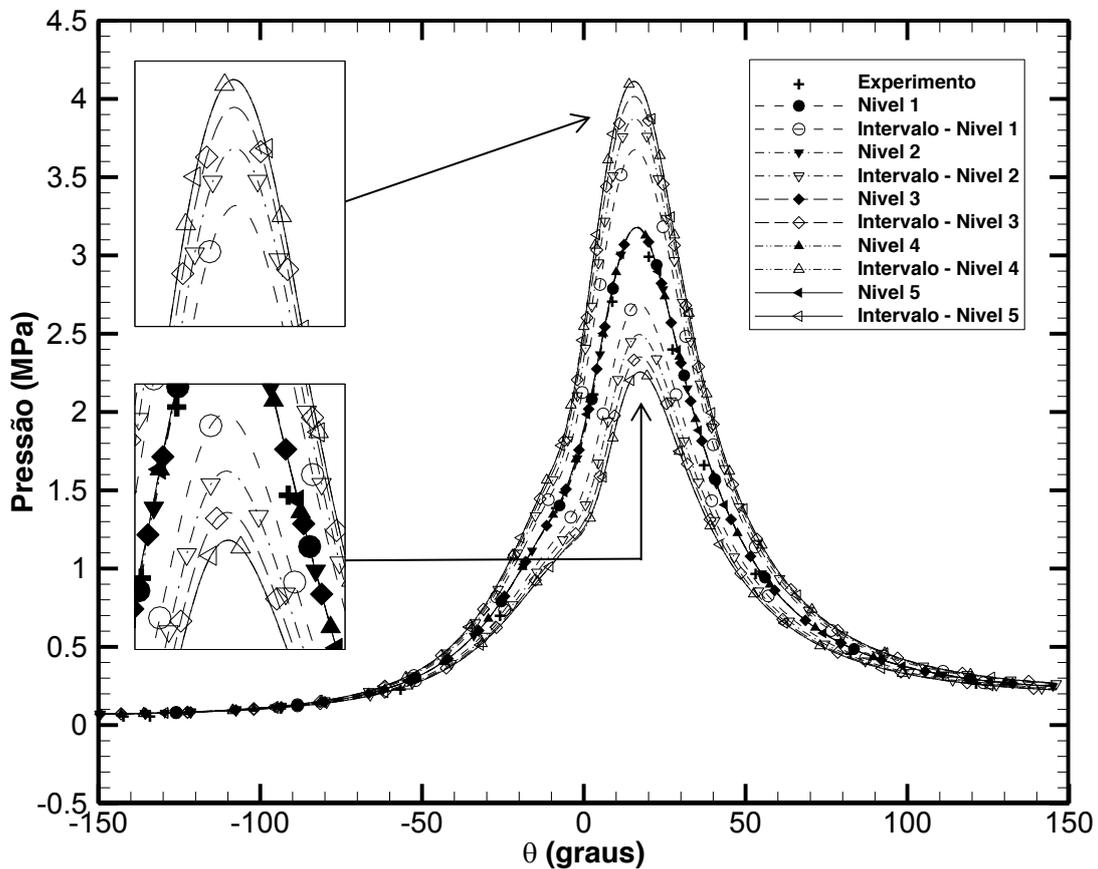


Figura 5.15 Convergência do MCE aplicado ao Modelo 5

Uma vez estabelecida a quantidade de pontos de colocação com o respectivo nível de interpolação, que garanta a convergência da solução, torna-se relevante investigar a verificação do código computacional elaborado para a aplicação do

Método de Colocação Estocástica por meio do confronto com os resultados obtidos pela simulação de Monte Carlo.

A técnica de quantificação de incerteza de referência é a simulação de Monte Carlo (MC), onde são avaliados 3 tamanhos de amostra (100.000, 250.000 e 400.000), a fim de verificar a convergência da solução. Os resultados do método MC serão confrontados com aqueles oriundos do Método de Colocação Estocástica com a malha esparsa adequada para a convergência de cada modelo.

A verificação do código computacional do Método de Colocação Estocástica aplicado ao Modelo 1 encontra-se na Fig. 5.16. A partir da comparação dos momentos estocásticos do Método de Colocação Estocástica com malha esparsa e dos momentos dados pela técnica de quantificação de incertezas de referência nesse estudo, tem-se que o código pode ser dado como verificado. Para tanto verifique a sobreposição das médias e dos limites do Intervalo de Incertezas. Vale destacar que a variância da pressão é verificada pelos Intervalos de Incerteza.

O Método de Colocação Estocástica necessitou apenas de 3 pontos de colocação para obter a convergência da solução, enquanto o método de Monte Carlo necessitou de uma amostra de tamanho igual 400.000. Dessa forma, para o Modelo 1, o MCE mostrou-se mais eficiente.

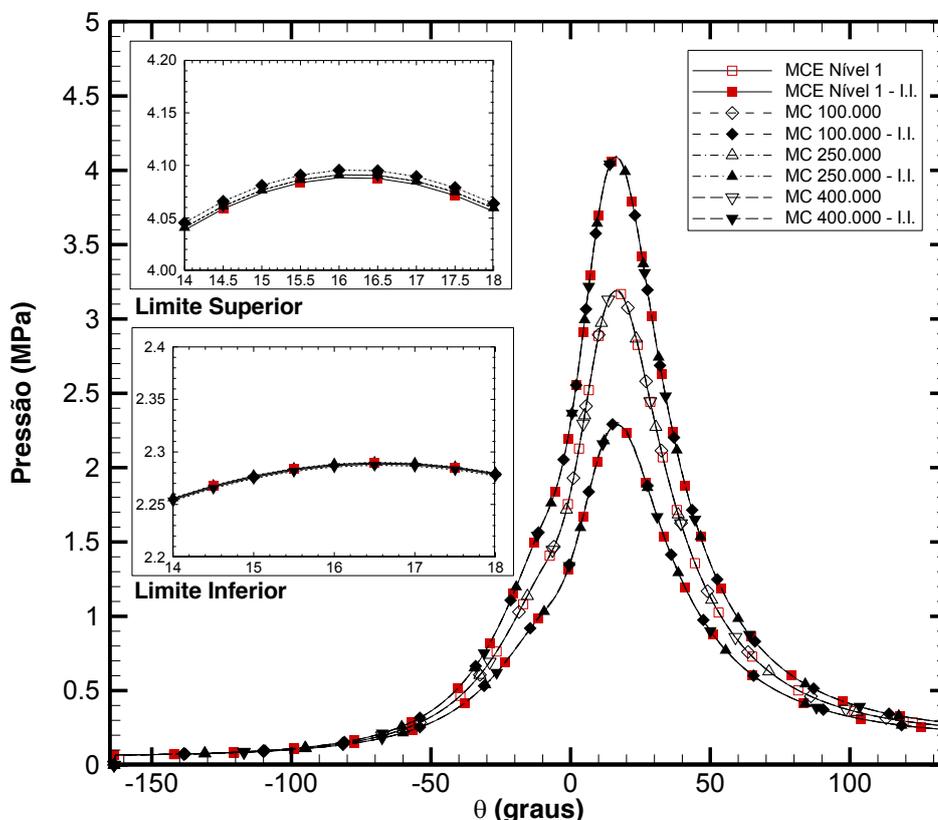


Figura 5.16 Verificação do MCE para o Modelo 1

As soluções estocásticas obtidas pelos métodos MCE e MC aplicados ao Modelo 2, bem como os Intervalos de Incerteza são confrontados na Fig. 5.16. Nota-se que os valores máximos e mínimos da pressão fornecidos pela simulação de Monte Carlo convergem com amostra de tamanho equivalente a 400.000. Já o Método de Colocação Estocástica necessitou de 29 pontos de colocação, que é muito inferior a quantidade de valores aleatórios empregados pelo MC.

Realizando um paralelo em relação à convergência de ambas as técnicas de quantificação de incertezas para o presente modelo estocástico, verificou-se que a convergência da solução não foi imediata para ambos. Para tanto, compare a Fig. 5.12 com a Fig. 5.17, evidenciando a sensibilidade da pressão em relação às incertezas agregadas à função de Wiebe e ao coeficiente de troca de calor.

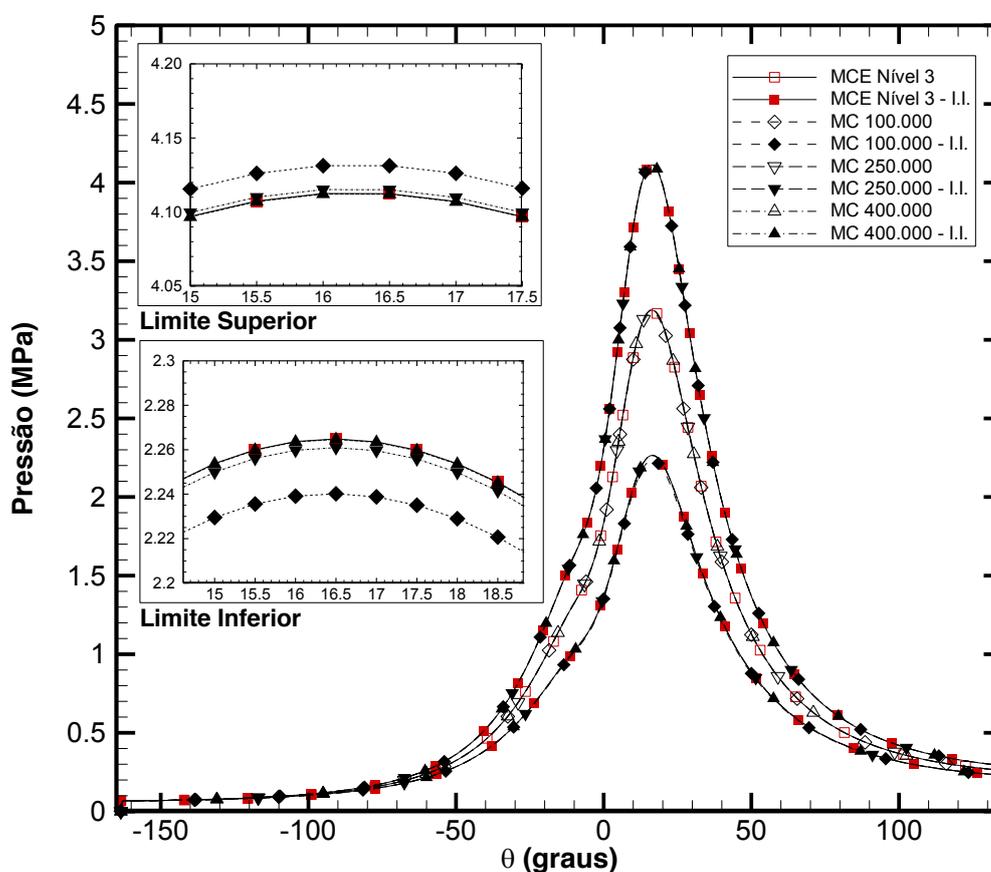


Figura 5.17 Verificação do MCE para o Modelo 2

A Fig. 5.18 apresenta a verificação do Método de Colocação Estocástica, para o Modelo 3, ao comparar com os resultados alcançados pela simulação de Monte Carlo. O critério de comparar os Intervalos de Incerteza equivale a comparar a variância a cada ângulo do virabrequim, bem como a média, pois ambas são importantes medidas estatísticas em um contexto estocástico. Note que os limites inferiores de ambos os Intervalos de Incerteza (valores mínimos da pressão), bem como os limites superiores (valores máximos da pressão), mostram-se coincidentes com amostra de tamanho

400.000 pelo MC, o que garante a verificação do código computacional elaborado para o MCE.

O confronto dos resultados da simulação de Monte Carlo aplicado ao Modelo 4 é confrontado com a solução estocástica do MCE com malha esparsa de nível 3, isto é, 69 pontos de colocação. Segundo nota-se na Fig. 5.19, os momentos estocásticos de ambas as técnicas concordam quando o método MC emprega amostra com tamanho igual a 400.000.

Vale lembrar que os modelos 3 e 4 possuem mesma dimensão estocástica, que é tridimensional, mas as incertezas foram consideradas de formas distintas. Contudo, mudar a combinação das variáveis estocásticas foi suficiente para retardar a convergência da solução estocástica do Modelo 4 em relação ao Modelo 3 para o MC.

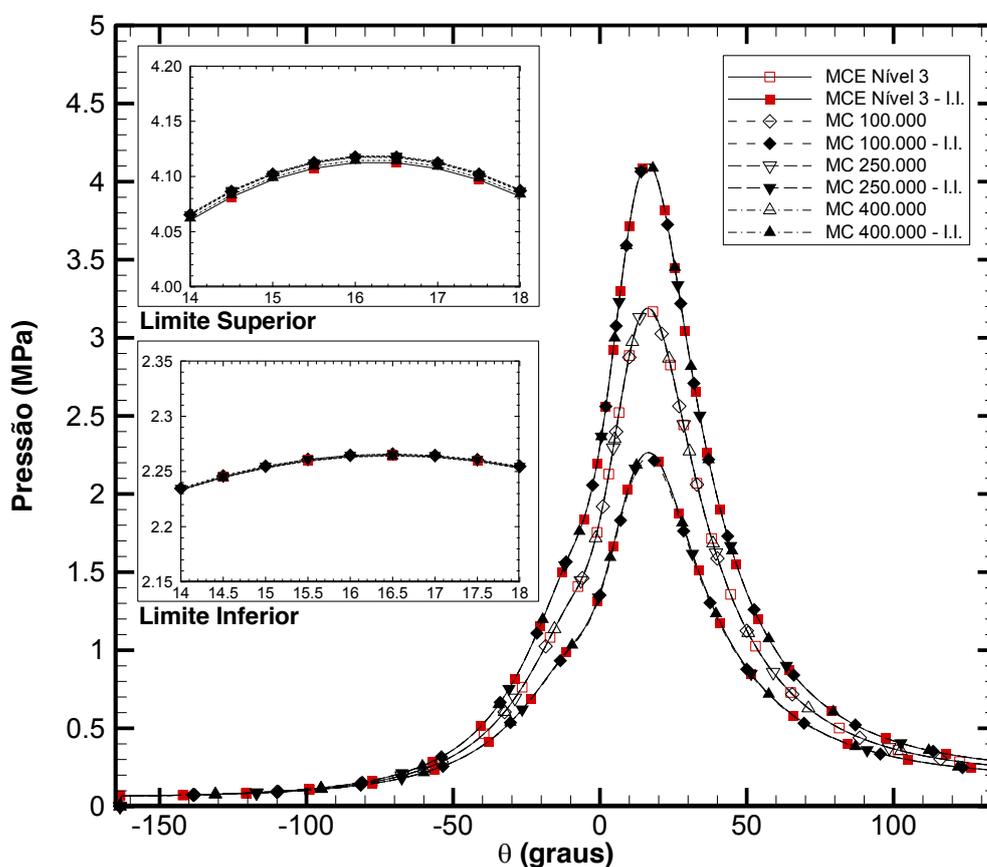


Figura 5.18 Verificação do MCE para o Modelo 3

A Fig. 5.20 exibe a comparação da solução estocástica da simulação de Monte Carlo para o Modelo 2 com os momentos estatísticos do Método de Colocação Estocástica para o mesmo modelo estocástico com 4 dimensões estocásticas. As médias de ambas as técnicas coincidem, bem como o limite superior do Intervalo de Incerteza. Embora o limite inferior do mesmo intervalo não tenha coincido, ambas as curvas estão suficientemente próximas. Para esse modelo, o MCE empregou 401

pontos de colocação, que corresponde a 0,27% da quantidade de pontos necessários para a convergência do MC.

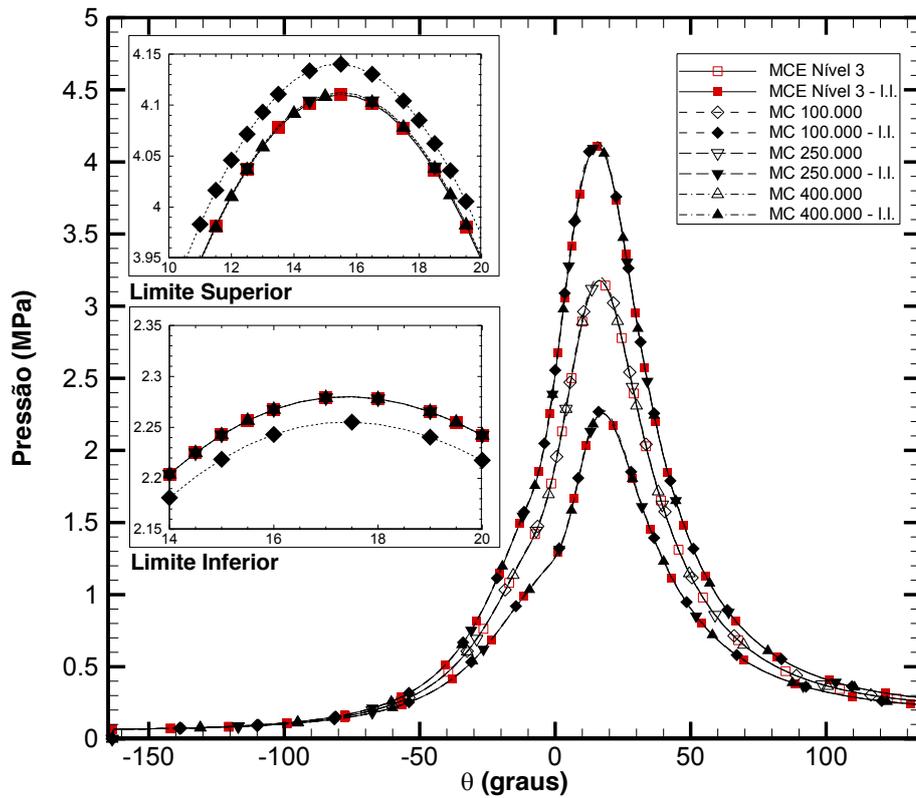


Figura 5.19 Verificação do MCE para o Modelo 4

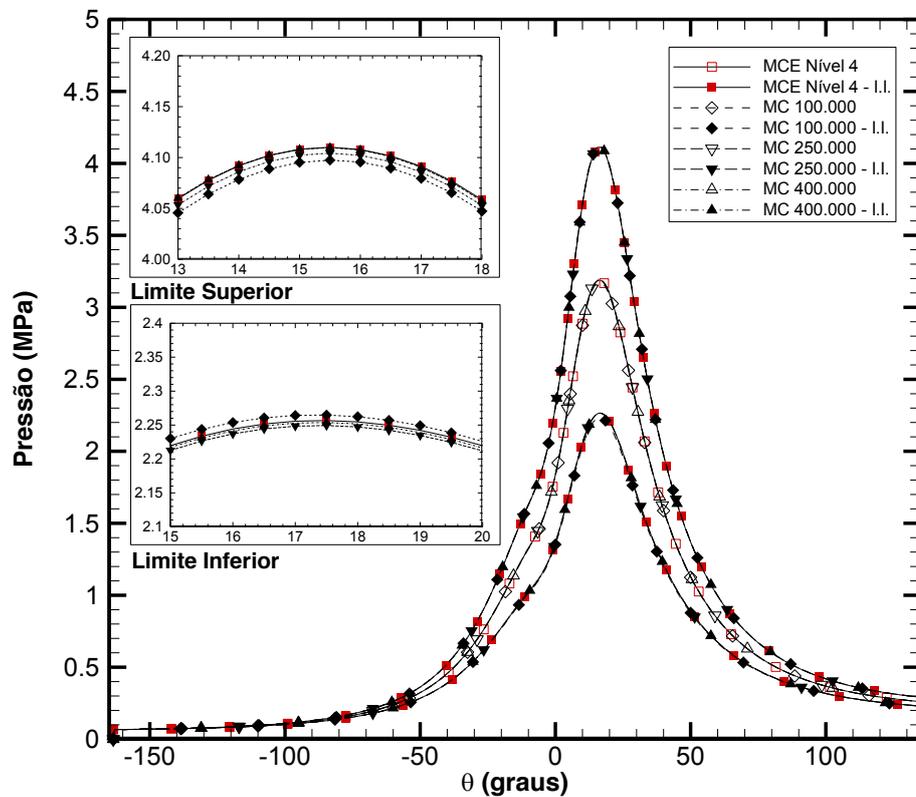


Figura 5.20 Verificação do MCE para o Modelo 5

Os diferentes modelos estocásticos propostos são comparados na Fig. 5.21, onde são apresentados como resultados os Intervalos de Incerteza, os quais foram obtidos pelo Método de Colocação Estocástica. Percebe-se claramente que as diferentes combinações das variáveis estocásticas causam variância distinta na pressão, principalmente no início da combustão ($-10,2^\circ$). Essa observação torna-se evidente para os valores máximos da pressão.

Durante o princípio da queima do combustível, no caso o etanol, ocorre um aumento brusco da pressão no interior da câmara de combustão e, por isso, a variância da pressão apresenta maior variabilidade nessa fase do ciclo de operação do motor.

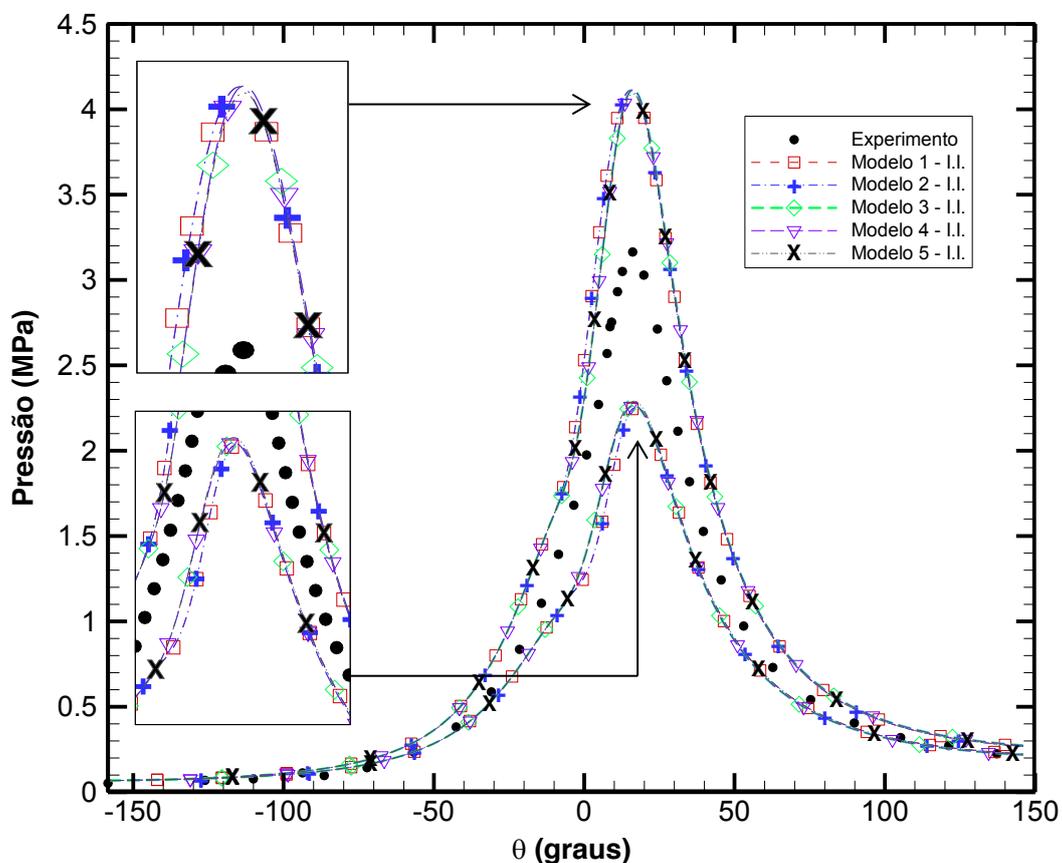


Figura 5.21 Comparação entre os Modelos estocásticos

Como foi possível verificar, ambos os métodos amostrais empregados nesta seção conseguiram obter a solução estocástica e, para este fim, solucionam o modelo diversas vezes conforme o tamanho da amostra, para a simulação de Monte Carlo, ou dependendo da quantidade de pontos de colocação, para o MCE.

O Método de Colocação Estocástica com malha esparsa se destaca por obter os momentos estocásticos, dos modelos sob incertezas, solucionando um modelo

determinístico uma quantidade de vezes consideravelmente inferior que a simulação de Monte Carlo. Por isso, torna-se relevante analisar o esforço computacional pelo tempo computacional necessário ao MCE para determinar a solução estocástica para os diferentes níveis de interpolação. Assim, o tempo de processamento de cada modelo e nível está apresentado na Tab. 5.20.

Tabela 5.20 Tempo computacional (min) do MCE

Nível	1	2	3	4	5
Modelo 1	0,062	0,073	0,078	0,088	0,107
Modelo 2	0,072	0,081	0,101	0,140	0,229
Modelo 3	0,076	0,097	0,147	0,264	0,554
Modelo 4	0,079	0,105	0,167	0,318	0,680
Modelo 5	0,080	0,122	0,246	0,571	1,457

O método de Monte Carlo para amostra de tamanho 100.000 consome aproximadamente 100 minutos e para amostra de tamanho 400.000 demora em torno de 400 min. Portanto, pela Tab. 5.20 para o caso mais exigente com dimensão estocástica igual a 4 (Modelo 5) e com maior nível de interpolação, o Método de Colocação Estocástica demorou 1 minuto e meio. Evidencia-se assim, o melhor desempenho do MCE com malha esparsa, a fim de simular sob incertezas um motor de combustão interna.

6. APLICAÇÃO A UM CASO REAL

A aplicação prática usará dados experimentais da pressão no interior do cilindro de um motor de combustão interna que opera em ciclo Diesel denominado MAN-Innovator 4C. Trata-se de um motor marítimo diesel cujo único exemplar no hemisfério sul está instalado no Laboratório de Maquinas Térmicas da COPPE/UFRJ.

O motor MAN-Innovator 4C opera em regime de rotação constante, possui potência de 500 kW, 4 válvulas por cilindro, 5 cilindros em linha e injeção do tipo direta (MAN Diesel & Turbo, 2010). No presente trabalho considera-se o motor abastecido com diesel marítimo, cujo PCI equivale a 42.700.000 J/kg (Bueno, 2011).

Pelo ponto de vista experimental, a investigação do comportamento da pressão e da temperatura no interior do cilindro do motor decorre do uso de sensores acoplados aos cilindros, os quais medem a variação do ângulo do eixo de manivelas e a pressão na câmara de combustão. A medição da pressão ocorreu com frequência de 28,8 kHz (a cada 0,25°), mas como um ciclo completo compreende 720° (2 revoluções do eixo de manivelas), então a curva experimental possui 2880 valores da pressão.

Na aquisição de dados, o motor completa o ciclo de operação diversas vezes (admissão, compressão, expansão e exaustão) e, conseqüentemente, são obtidas diferentes curvas de pressão, cujos valores oscilam principalmente durante a combustão, por exemplo. Em outras palavras, o perfil da pressão durante os processos de compressão, combustão e expansão, alvo dessa pesquisa, deve ser visto como um intervalo de valores a cada ângulo do eixo de manivelas. Vale frisar que as curvas de pressão experimentais empregadas nesse estudo correspondem ao ciclo médio dos ciclos adquiridos por um sensor.

Conforme a metodologia de trabalho proposta, o Método de Colocação Estocástica solucionará o modelo estocástico (com incerteza Uniforme) do fenômeno físico em estudo e, a partir do momento estocástico (média e variância), será usado o Intervalo de Incerteza como resultado da simulação sob incertezas. Sendo assim, será possível simular a variabilidade da pressão como ocorre em um caso real, isto é, em um experimento. Nesse contexto, os dados experimentais serão usados para validar os resultados.

A fim de realizar a simulação computacional sob incertezas necessitam-se dos dados referentes à geometria do motor e as condições operacionais. Assim, a Tab. 6.1 disponibiliza os dados técnicos do motor e a Tab. 6.2 exhibe os dados operacionais do motor. Ambas as tabelas fornecem os dados necessários para a simulação.

Tabela 6.1 Dados técnicos do MAN-Innovator 4C (MAN Diesel & Turbo, 2010)

Símbolo	Parâmetros	Valores
D	Diâmetro do cilindro (mm)	160
S	Curso do pistão (mm)	240
l	Comprimento da biela (mm)	480
V_d	Cilindrada total (cm ³)	24000
r	Razão de compressão	15,2:1
θ_{FVA}	Ângulo de fechamento da válvula de admissão ¹	-136°
θ_{AVD}	Ângulo de abertura da válvula de descarga ¹	140°
N	Rotação (RPM)	1200

Tabela 6.2 Dados operacionais do MAN-Innovator 4C (Bueno, 2011)

Carga (%)	Unidade	25	50	75	100
T_{adm}	K	314,15	313,15	318,15	320,15
P_{adm}	bar	1,35	1,88	2,64	3,62
T_p	K	353,15	353,15	353,15	353,15
V_{ar}	kg/h	1001,66	1733,31	2456,25	3275,00
V_{comb}	kg/h	28,75	49,75	70,50	94,00
$\Delta\theta$	graus	36,00	41,42	43,33	48,08
θ_0	graus	-2,8	-2,6	-2,3	-2,5
Potência	kW	125	250	375	500

Na subseção 5.2.2 foram propostos diferentes modelos estocásticos cuja solução estocástica foi obtida pelo Método de Colocação Estocástica. Dentre as formulações matemáticas com incertezas investigadas, aquela que apresentou maior variância da pressão em detrimento de considerar as incertezas agregadas às seguintes variáveis:

- parâmetros ajustáveis da função de Wiebe (a e m);
- razão entre calores específicos (γ);
- coeficiente de troca de calor convectivo (h);

Devido aos resultados alcançados na subseção 5.2.2, com o modelo estocástico de dimensão estocástica igual a 4, o mesmo foi escolhido para modelar sob incerteza o motor marítimo MAN. A fim de facilitar a compreensão e a leitura, o modelo estocástico adotado para representar o comportamento termodinâmico do gás no interior do cilindro do motor Diesel, foi estudado na subseção 5.2.2 e será exposto a seguir,

$$\frac{1}{\gamma_e - 1} \frac{1}{T} \frac{dT}{d\theta} = \frac{1}{PV} \left[Q_{total} \frac{dX_e}{d\theta} - f_{cor} \left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e \right] - \frac{1}{V} \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (6.1)$$

$$\frac{1}{\gamma_e - 1} \left[P \frac{dV}{d\theta} + V \frac{dP}{d\theta} \right] = Q_{total} \frac{dX_e}{d\theta} - f_{cor} \left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e - P \frac{dV}{d\theta} \quad \theta_{FVA} < \theta < \theta_{AVD} \quad (6.2)$$

$$T(\theta_{FVA}) = T_{adm} \quad (6.3)$$

$$P(\theta_{FVA}) = P_{adm} \quad (6.4)$$

onde tem-se as seguintes variáveis com incerteza,

$$\left(\frac{\delta Q_p}{dt} \right)_e = h_e(\theta, \xi_4) A(\theta) [T(\theta) - T_p] \quad (6.5)$$

$$a_{w_e} = \bar{a}_w (1 + \sigma \xi_1) \quad (6.6)$$

$$X_e(\theta, \xi_1, \xi_2) = \begin{cases} 0 & , \quad \theta < \theta_0 \\ 1 - \exp \left[-a_{w_e} \left(\frac{\theta - \theta_0}{\Delta\theta} \right)^{m_{w_e} + 1} \right] & , \quad \theta_0 \leq \theta \leq \theta_0 + \Delta\theta \\ 1 & , \quad \theta > \theta_0 + \Delta\theta \end{cases} \quad (6.7)$$

$$a_{w_e} = \bar{a}_w (1 + \sigma_1 \xi_1) \quad (6.8)$$

$$m_{w_e} = \bar{m}_w (1 + \sigma_2 \xi_2) \quad (6.9)$$

$$\gamma_e = \bar{\gamma} (1 + \sigma_3 \xi_3) \quad (6.10)$$

$$h_e(\theta, \xi_4) = \bar{h}(\theta) (1 + \sigma_4 \xi_4) \quad (6.11)$$

Vale salientar que as incertezas consideradas no modelo descrito pelas Eqs. (6.1-11) seguem uma distribuição Uniforme, pois a distribuição de cada variável não é conhecida e, por isso, ao adotar tal distribuição de probabilidade, a variável estocástica tem a mesma probabilidade de assumir valores em um determinado intervalo.

Na subseção 5.2.2 foi descrito como determinar o valor médio, o intervalo para distribuição Uniforme e o desvio-padrão (Eq. (5.2.2.1)) de cada variável estocástica.

O coeficiente de troca de calor por convecção com incerteza permanecerá distribuído uniformemente em $[\bar{h} - 1,13\bar{h}; \bar{h} + 1,13\bar{h}]$, onde o valor médio (\bar{h}) é dado pela correlação de Woschni. O desvio-padrão foi determinado a partir de uma figura disponível em Borman e Nishiwaki (1987), onde foram comparadas diferentes correlações para o parâmetro h para uma mesma condição operacional do motor. O valor de σ usado no intervalo para distribuição Uniforme foi calculado pela diferença relativa entre os valores máximos entre a correlação de Woschni e a de Pflaum, ao tomar por referência o maior valor de h para a correlação de Woschni (média).

Os parâmetros com incertezas a_{w_e} , m_{w_e} e k_e , devem ter seu valor médio e, conseqüentemente, o intervalo de distribuição Uniforme revistos, a fim de que assumam valores que possuam contrapartida física para a modelagem de um motor Diesel.

Considera-se eficiência da combustão do Diesel igual a 99% para $\bar{a}_w = 6,9$ (Serrano *et al.*, 2009). Logo, com base em valores usuais desse parâmetro, se propõe a variável estocástica a_{w_e} com distribuição Uniforme em $[6,4; 7,4]$ e, pela Eq. (5.2.2.1) encontra-se $\sigma_1 = 0,07$. O parâmetro com incerteza m_{w_e} deverá ser distribuído uniformemente no intervalo $[1,3]$, onde os valores assumidos pelo mesmo são típicos. Além disso, pela Eq. (5.2.2.1) determina-se $\sigma_2 = 0,50$.

A razão de calores específicos para o ciclo Diesel varia tipicamente de 1,3 a 1,41 (Ebrahimi, 2010). Portanto, a variável estocástica (γ_e) será distribuída uniformemente no intervalo $[1,33; 1,4]$, que é menor que aquele empregado no estudo realizado na subseção 5.2.2. Portanto, $\bar{\gamma} \cong 1,37$ e $\sigma_3 = 0,08$.

A presente pesquisa propõe aplicar o Método de Colocação Estocástica por meio da Interpolação de Lagrange com malha esparsa e, dessa forma, determinar Intervalos de Incerteza, para o caso em que as incertezas seguem uma distribuição Uniforme. Dessa maneira, o Intervalo de Incerteza abrange os diferentes valores reais do perfil de pressão no interior da câmara de combustão, entre o fechamento da válvula de admissão e o fechamento da válvula de descarga, durante o funcionamento de um motor de combustão interna. Possibilitando assim, mostrar a viabilidade de aplicação da metodologia proposta em uma situação real.

Empregando o código computacional verificado na subseção 5.2.2 e usando os dados das Tab. 6.1 e 6.2 foram obtidas as Fig. 6.1, 6.2, 6.3 e 6.4., que correspondem às condições operacionais de 25%, 50%, 75% e 100% de carga. Cabe mencionar que aumentar a carga significa impor vazões maiores de combustível e ar.

Juntamente com os resultados da simulação sob incertezas serão apresentadas a curva experimental da pressão com a respectiva incerteza expandida (I_E) a cada ângulo do eixo de manivelas, que é o valor final de incerteza para uma determinada variável e que determina um intervalo dentro do qual existe a maior probabilidade de se encontrarem valores que poderão ser atribuídos ao valor verdadeiro (Melo, 2006).

A partir dos dados experimentais serão calculadas as incertezas de medição conforme Melo *et al.* (2006). Segundo o mesmo, a incerteza de medição apresenta duas componentes, uma devida a repetitividade de resultados de medições sucessivas (tipo A) e outra devido ao certificado de calibração dos instrumentos e materiais de referência, a resolução do instrumento, etc (tipo B).

A incerteza do tipo A é dada pela Eq. 6.12 (Melo, 2006),

$$I_A = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \quad (6.12)$$

onde n é o número de medidas (nessa pesquisa n equivale a 200) e σ é o desvio-padrão das medidas, que é calculado a partir da amostra.

A incerteza do tipo B caracteriza-se pela combinação de diferentes fatores e é dada pela Eq. (6.13) (Melo, 2006),

$$I_B = \sqrt{f_1^2 + \dots + f_i^2} \quad (6.13)$$

onde i é um número natural que depende da quantidade de componentes da incerteza e nessa aplicação adotou-se $f_i = 0.1$ bar para $i = 1, \dots, 200$.

Tanto a incerteza do tipo A quanto a do tipo B são usadas para calcular a incerteza combinada (I_C), que é um desvio-padrão estimado conforme a Eq. (6.14) (Melo, 2006),

$$I_C = \sqrt{I_A^2 + I_B^2} \quad (6.14)$$

A incerteza expandida (I_E) é calculada pela seguinte Eq. (6.15) (Melo, 2006),

$$I_E = K I_C \quad (6.14)$$

onde K é o fator de abrangência, o qual representa o total de graus de liberdade da variável. Quando não se conhece o tipo de distribuição da variável usa-se $K = \sqrt{3}$ (distribuição uniforme) (Melo, 2006).

O Intervalo de Incerteza (I.I.) associado aos dados experimentais é da forma $(\mu - K I_C, \mu + K I_C)$, onde μ é a média da pressão para os 200 ciclos a cada ângulo do eixo de manivelas. Além disso, com tal intervalo se espera abranger uma vasta fração da distribuição de valores que podem ser razoavelmente atribuídos ao mensurado (pressão).

Na Fig. 6.1 observa-se que a curva da pressão experimental está delimitada pelos limites do Intervalo de Incerteza desde o fechamento da válvula de admissão até a abertura da válvula de descarga. Note que a curva experimental se aproxima do

limite superior do Intervalo de Incerteza durante processo de expansão dos gases, composto pelos produtos da combustão, até a abertura da válvula de descarga. Como esperado, os valores máximos e mínimos da pressão dado pelo Intervalo de Incerteza não seguem o comportamento exato dos dados experimentais durante a combustão (fase de combustão pré-misturada e a fase da combustão difusiva), entre os ângulos -2,8° e 20°. Essa diferença se deve às hipóteses de trabalho, pois o intuito da simulação sob incerteza reside em determinar um valor máximo e mínimo para a pressão, conforme mostra o presente gráfico. Perceba que no Ponto Morto Superior (0°) existe uma elevação abrupta da pressão, a qual é capturada pelo Intervalo de Incerteza. Tal elevação brusca da pressão se deve ao atraso de ignição, que se prolonga mais em decorrência das baixas temperaturas residuais na câmara de combustão, que, por sua vez, ocasionam um aumento no tempo necessário para o início da queima do combustível (Pasqualetto, 2015). Além disso, Os valores máximos e mínimos simulados contêm os I.I. experimentais entre -20° e 30°

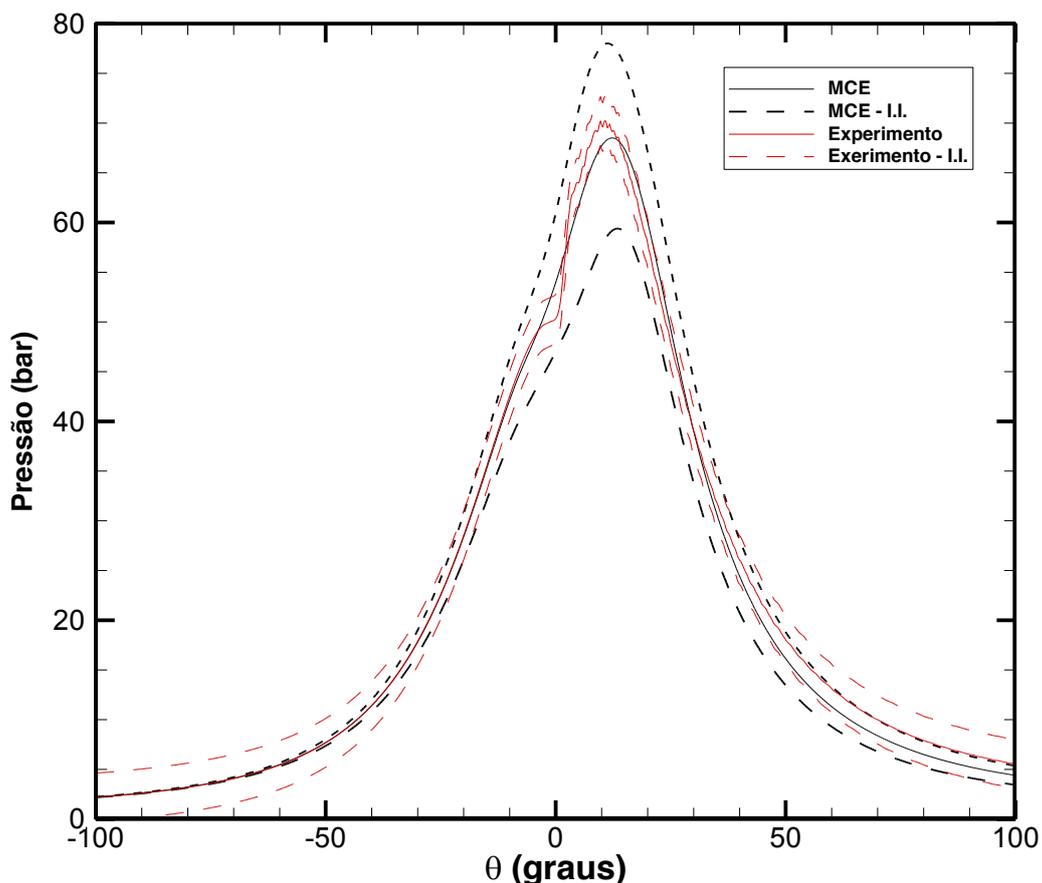


Figura 6.1 Motor MAN com 25% de carga

O Intervalo de Incerteza obtido pela simulação computacional sob incertezas do motor MAN-Innovator 4C com 50% de carga (250 kW de potência), pode ser analisado

na Fig. 6.2. Diferentemente da condição operacional com metade da presente carga, durante o início da compressão da mistura de ar com combustível e no final do processo de expansão, os valores experimentais não se encontram centralizados no intervalo. Isso decorre da pressão média simulada sob incertezas, dada pelo Método de Colocação Estocástica (MCE), não coincidir com os dados experimentais, uma vez que parâmetros como a e m na função de Wiebe não foram ajustados ou a razão entre calores específicos (γ) ser constante, por exemplo. Contudo, o objetivo da inclusão da incerteza consiste em encontrar valores máximos e mínimos para a pressão coerentes com a realidade e, ao mesmo, não aumentar a complexidade do modelo estocástico. Ainda assim, o Intervalo de Incerteza capta, entre seus valores máximos e mínimos, os valores reais da pressão experimental representante do ciclo médio, o qual se determina pela média dos valores medidos da pressão, a cada ângulo do eixo de manivelas, para os ciclos medidos na bancada de teste por Melo (2007). Vale destacar que ao aumentar a carga de operação do motor foi possível incluir os I.I. experimentais entre os valores máximos e mínimos simulados entre -20° e 40° .

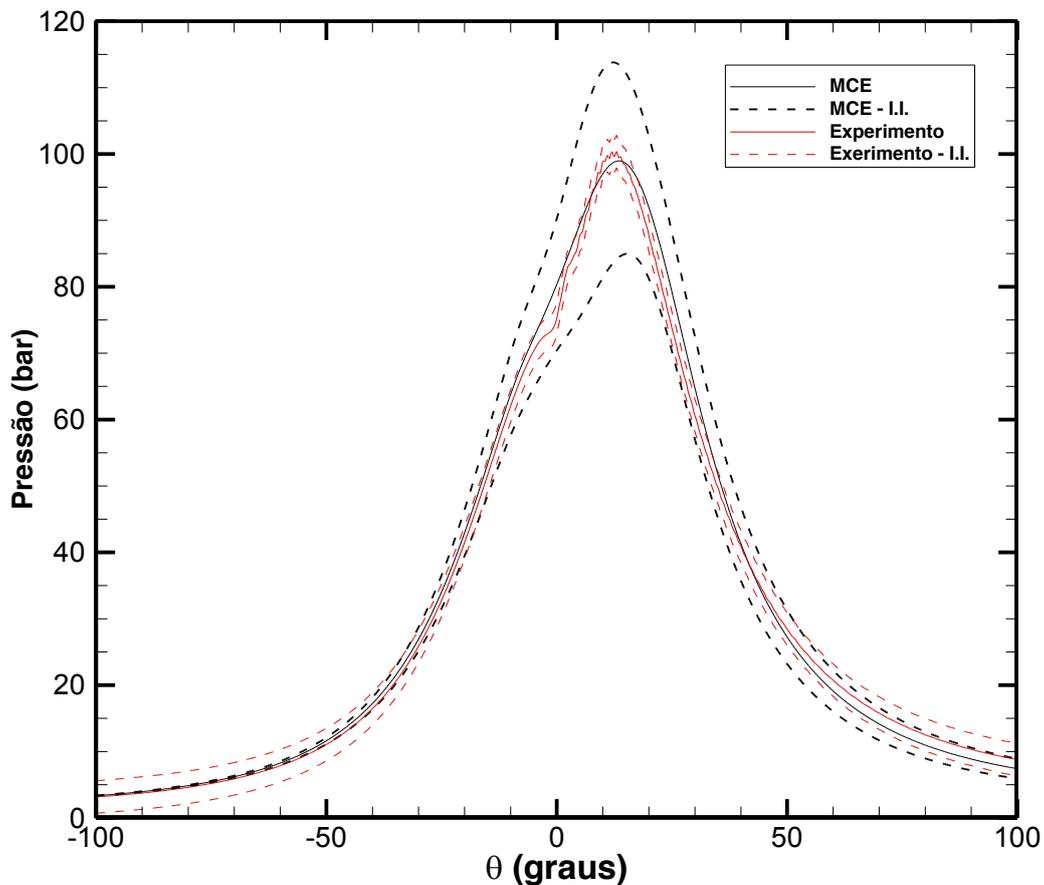


Figura 6.2 Motor MAN com 50% de carga

A aplicação da metodologia proposta nessa tese ao motor marítimo operando com 75% da carga máxima encontra-se na Fig. 6.3. Nesse gráfico percebe-se que o perfil de pressão experimental apresenta comportamento semelhante ao visto para 50% da carga máxima, em relação aos limites do Intervalo de Incerteza simulado, durante o processo de expansão dos gases. Contudo, em torno do valor máximo da pressão, tais limites se ampliam em comparação ao uso de 50% de carga. Esse fato se deve ao aumento da liberação de energia para o sistema em virtude da queima do combustível, que foi modelado com incerteza. Mais especificamente, o fenômeno da combustão foi modelado por uma equação empírica (Eq. 6.7) cujos 2 parâmetros foram considerados com incertezas. Também é importante notar que a simulação sob incertezas do motor operando com 75% da carga máxima ocasionou na inclusão de uma maior parte do I.I. experimental entre os limites do I.I. simulado por meio do MCE.

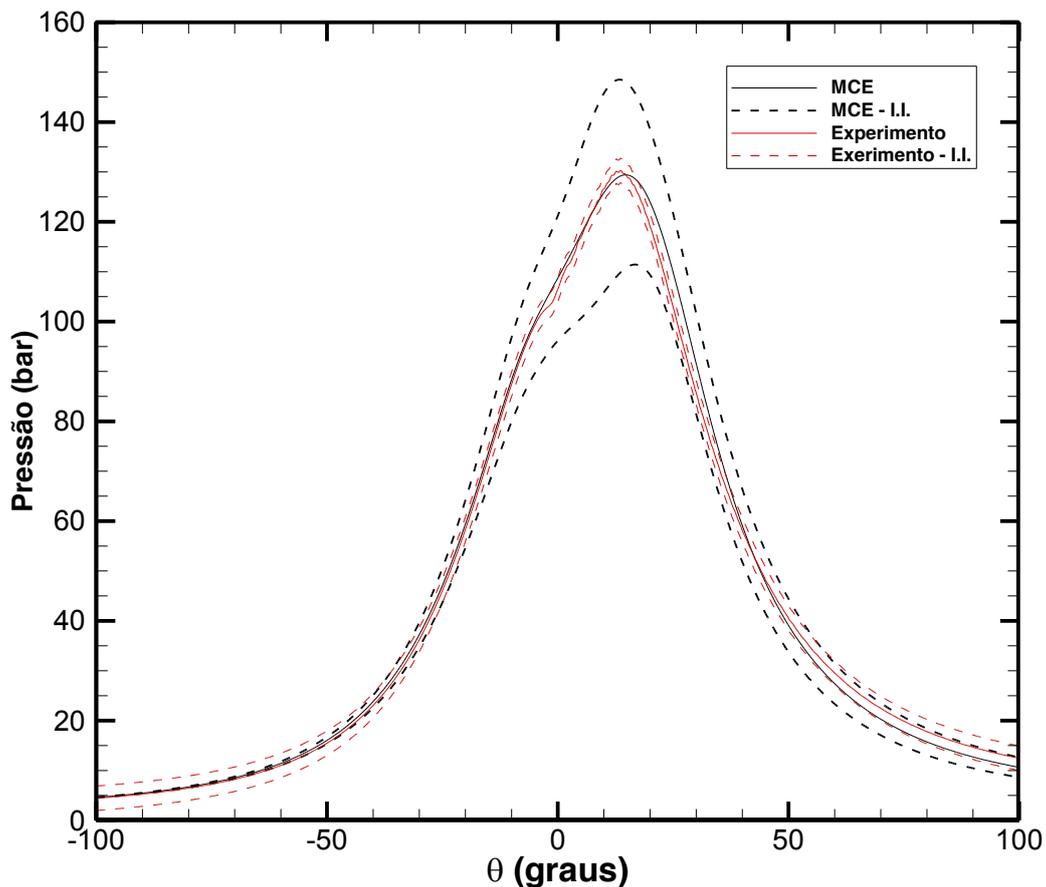


Figura 6.3 Motor MAN com 75% de carga

A Fig. 6.4 apresenta comportamento semelhante entre a curva experimental e o Intervalo de Incerteza (I.I.) para o motor com carga máxima. Mas, em torno do Ponto Morto Superior (0°) as limitações do Intervalo de Incerteza se tornam mais

pronunciadas se comparadas ao da Fig 6.3 (75% de carga). O aumento na amplitude do I.I. está associado às incertezas agregadas ao modelo que representa a liberação de energia proveniente da queima do diesel (função de Wiebe), bem como a sensibilidade do modelo estocástico às variações nesse modelo. Vale salientar que os valores máximos e mínimos da pressão simulada sob incertezas, a cada ângulo do eixo de manivelas, mostram-se satisfatórios, pois o modelo estocástico não foi ajustado para representar especificamente a queima do diesel no motor marítimo, como tipicamente ocorre em uma simulação determinística. Cabe destacar que a simulação sob incertezas do funcionamento do motor com carga máxima foi possível incluir, entre os valores máximo e mínimos simulados da pressão, uma maior variação do eixo de manivelas para o I.I. experimental, especificamente, entre -40° e 60° .

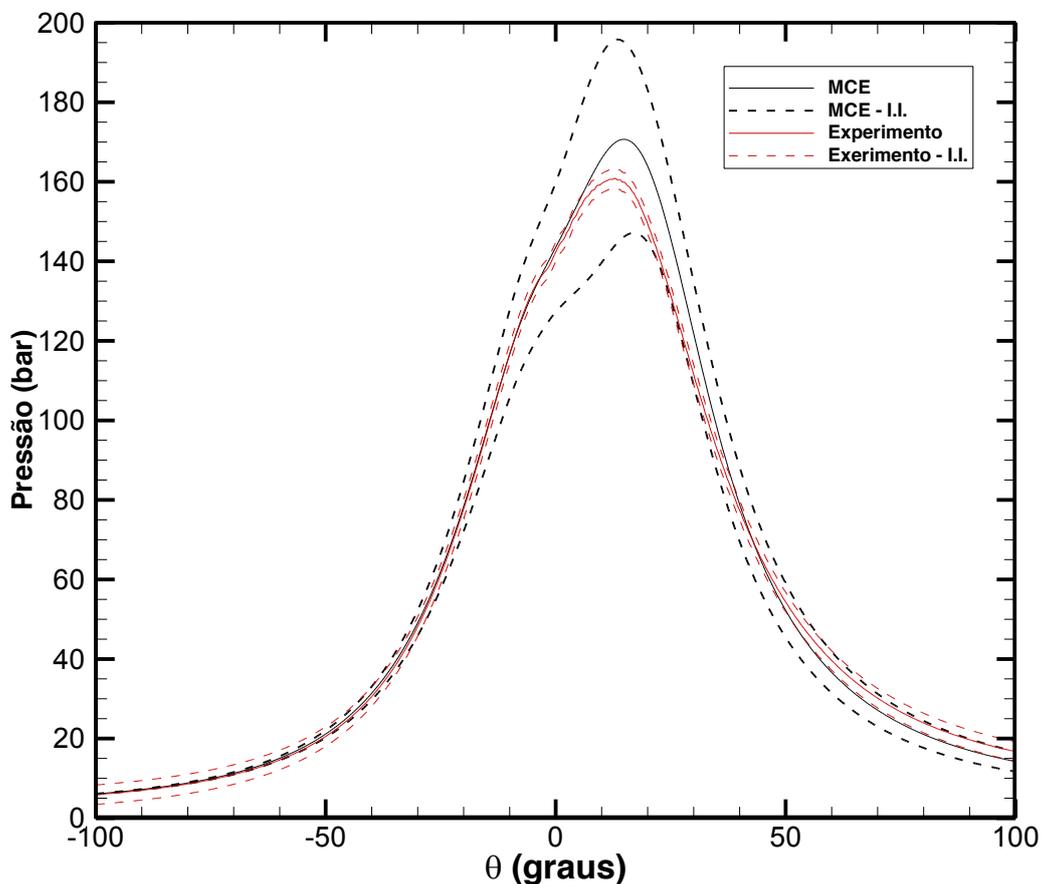


Figura 6.4 Motor MAN com 100% de carga

Para avaliar a proximidade entre os limites do Intervalo de Incerteza e a curva experimental da pressão, será empregado o valor máximo do experimento (P_{exp}), do limite superior (II_{sup}) e inferior do I.I. (II_{inf}), a fim de calcular a diferença relativa tomando o maior valor do experimento como referência. Assim, os resultados são

apresentados na Tab. 6.3. Salienta-se que essa análise quantitativa ocorre para os valores máximos, pois os mesmos ocorrem durante a combustão, que a fase de maior variabilidade da pressão dos gases na câmara de combustão.

A Tab. 6.3 mostra que para as cargas intermediária (50% e 75%) os Intervalos de Incerteza, durante a fase difusiva da combustão, apresentaram, aproximadamente, a mesma distância dos valores experimentais da pressão. Diferentemente, para a carga mais baixa, o pico da pressão do experimento encontra-se mais próximo do valor máximo da pressão simulada sob incertezas. O contrário se verifica para a carga máxima, onde o valor mínimo da pressão simulada está consideravelmente menos distante do valor experimental. Mais ainda, para as diferentes condições operacionais do motor diesel marítimo, simulado sob incerteza via Método de Colocação Estocástica, em torno da pressão máxima durante a combustão, o Intervalo de Incerteza compreende o valor real e o compreende entre valores compatíveis com a física do fenômeno em estudo.

Conforme pode ser observado nas figuras desse capítulo a metodologia de trabalho foi aplicada com sucesso na simulação sob incertezas do motor MAN Innovator-4c abastecido com diesel marítimo, onde foram consideradas diferentes percentagens da carga máxima (25%, 50%, 75% e 100%). Em todos os casos avaliados, o Intervalo de Incerteza captura a curva de pressão experimental entre valores condizentes com a realidade. Também como esperado, o desvio-padrão da pressão aumenta com o aumento da carga do motor.

Tabela 6.3 Diferença relativa entre o valor máximo da pressão experimental e o Intervalo de Incerteza

Carga (%)	25	50	75	100
$\frac{ P_{exp} - I.I._{sup} }{P_{exp}} 100\%$	11,67	14,25	14,00	21,98
$\frac{ P_{exp} - I.I._{inf} }{P_{exp}} 100\%$	14,98	14,81	14,46	8,41

Mostra-se, assim, a aplicabilidade da metodologia de trabalho proposta nessa pesquisa em um caso real, de forma que, em posse dos dados técnicos e operacionais de um motor em fase de projeto, torna-se possível investigar o funcionamento do mesmo, entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de descarga, por meio de uma simulação sob incertezas.

Cabe destacar que a função de Wiebe, que representa a liberação de energia proveniente da queima do combustível para o sistema, possui parâmetros ajustáveis e

estes não foram ajustados para representar especificamente a queima do Diesel no motor MAN. Mais ainda, a razão entre calores específicos, que varia em função da temperatura, foi considerada constante. Outro parâmetro do modelo que pode ser ajustado é a troca de calor pela parede, o qual também não foi ajustado.

7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

A pesquisa realizada neste trabalho consistiu em prever o comportamento da pressão e da temperatura dentro da câmara de combustão de um motor Otto abastecido com biocombustível (etanol) e de um motor diesel marítimo (Man Innovator-4c), considerando variáveis com incerteza nos modelos estocásticos propostos.

Foi conduzido um estudo bibliográfico em torno de alguns conceitos relevantes no processo de modelagem termodinâmica de motores e sobre a simulação computacional de motores de combustão interna. Foram ainda apresentadas diferentes aplicações no tratamento de incertezas pelos métodos do Polinômio de Caos e de Colocação Estocástica.

O problema foi modelado por abordagem termodinâmica e tal formulação matemática serviu de base para a elaboração de modelos estocásticos. Os modelos com incertezas foram propostos a fim de prever o funcionamento do motor em termos de valores máximos e mínimos das grandezas termodinâmicas, pois os modelos matemáticos determinísticos por si só não representam toda a complexidade do fenômeno físico em estudo.

Os fenômenos de compressão, combustão e expansão no interior de um motor de combustão interna ocorrem entre o fechamento da válvula de admissão e a abertura da válvula de descarga. A liberação de calor proveniente da queima do combustível foi modelada pela equação de Wiebe e a mistura ar-combustível foi adotada como estequiométrica somente para a simulação sob incertezas de um motor operando em ciclo Otto. Além disso, a razão entre calores específicos foi adotada como constante.

As simulações numéricas forneceram curvas de pressão e temperatura do gás no interior do cilindro de acordo com a variação do eixo do virabrequim (eixo de manivelas). Vale destacar que na primeira etapa desse estudo foram consideradas as incertezas na equação empírica que modela a fração mássica de combustível queimado, a qual quantifica a energia liberada para o sistema. A escolha de onde considerar a incerteza se deve ao fato da formulação matemática da queima do combustível ser um fenômeno físico-químico mais complexo e sujeito à incertezas. O modelo estocástico da primeira fase da pesquisa foi solucionado pelo método de Polinômio de Caos generalizado.

A princípio, o estudo da tese delineou uma metodologia que se baseou na verificação do código computacional por meio da verificação dos resultados, para o

problema determinístico, com dados experimentais reportados da literatura, os quais mostraram concordância.

Em seguida, se procedeu a inserção de incerteza no parâmetro referente à liberação de energia para o sistema pela queima do combustível e a câmara de combustão foi considerada adiabática. As técnicas utilizadas para resolver o problema foram o Polinômio de Caos generalizado e o método Monte Carlo. Distribuições Gaussiana e Uniforme para a incerteza foram consideradas. Os resultados mostraram que o aumento do grau do Polinômio de Caos utilizado na expansão proporcionou maior precisão nos resultados estocásticos obtidos. Este fato reside da relação existente entre a quantidade de termos na expansão espectral e o grau do polinômio.

A segunda etapa do estudo propôs cinco modelos estocásticos distintos e elaborados a partir de um modelo determinístico. A investigação de diferentes formulações estocásticas reside na análise de quais parâmetros e/ou funções devem ser consideradas as incertezas, a fim de averiguar a propagação das incertezas por meio dos intervalos de incerteza, os quais permitem avaliar a variância das grandezas termodinâmicas a cada ângulo do eixo de manivelas. A solução nessa etapa da pesquisa foi obtida pelo Método de Colocação Estocástica, cujo código computacional foi verificado ao confrontar com os resultados fornecidos pela simulação de Monte Carlo. Além disso, verificou-se a convergência da solução estocástica proveniente do MCE para cada modelo estocástico.

As técnicas Polinômio de Caos generalizado e de Colocação Estocástica, pelo desempenho mostrado na simulação sob incertezas de motores de combustão interna, principalmente em relação ao esforço computacional, se mostram mais vantajosas que técnicas amostrais, como a simulação de Monte Carlo, com destaque para o MCE com malha esparsa, que possui aplicação relativamente simples por usar um código computacional pré-existente elaborado para solucionar numericamente um modelo determinístico. Os resultados e conclusões da aplicação de ambas as técnicas de propagação de incertezas foram apresentadas no capítulo 5.

A metodologia proposta na tese foi aplicada a um caso real e os resultados e conclusões foram apresentadas no capítulo 6. A aplicação com uso de dados experimentais residiu em simular sob incertezas o funcionamento do motor marítimo MAN-Innovator 4C para diferentes condições operacionais, ou seja, 25%, 50%, 75% e 100% da carga máxima. Em todas as situações o Método de Colocação Estocástica com malha esparsa determinou Intervalos de Incerteza, isto é, valores máximos e mínimos da pressão com valores que compreendem os valores reais de um experimento. Mostrando, dessa forma, a viabilidade de aplicação da abordagem

proposta na presente tese. Como por exemplo, na investigação do funcionamento de um motor de combustão interna em fase de projeto.

A meta da presente pesquisa residiu em investigar a simulação sob incertezas de motores de combustão interna via técnicas não amostral intrusiva (Polinômio de Caos generalizado) e amostral não intrusiva (Colocação Estocástica com malha esparsa). Pelos bons resultados alcançados, os mesmos podem servir de ponto de partida para trabalhos futuros em relação ao emprego de outras técnicas de quantificação de incertezas, bem como na investigação de outros modelos termodinâmicos estocásticos de motores de combustão interna.

Em futuras investigações sobre quantificação de incertezas pelo Método de Colocação Estocástica podem ser usadas outras abcissas para interpolar a função no espaço estocástico ou associar uma técnica adaptativa à malha esparsa.

Outros modelos termodinâmicos estocásticos podem ser estudados ao serem feitas as seguintes considerações para um motor operando em ciclo Otto:

1. modelo zero-dimensional em 2 zonas (uma com mistura ar-combustível e outra com os produtos da combustão);
2. razão de calores específicos (γ) em função da temperatura;
3. usar outras correlações para o coeficiente de troca de calor (h) ou combinações das correlações;

Já para a modelagem do motor Diesel em um contexto termodinâmico, além das hipóteses citadas, outras considerações se aplicam, tal como:

1. modelar a liberação de energia para o sistema fornecida pela combustão por meio da equação de Wiebe dupla;
2. atraso de ignição;
3. formação de óxidos de nitrogênio;
4. calor específico a pressão constante para os reagentes diferente dos produtos.

Pelos resultados obtidos na aplicação a um caso real, a carga do motor (dado de entrada) e os Intervalos de Incerteza (dado de saída) são grandezas diretamente proporcionais. Assim, para aumentar a confiança seria interessante considerar incerteza relativa nas variáveis estocásticas, a fim de estabilizar os Intervalos de Incerteza em relação ao aumento da carga.

Essas são algumas sugestões para possíveis trabalhos que possam surgir a partir da presente Tese, pois se mostra promissor o campo de pesquisa em simulação sob incertezas de motores de combustão interna.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Alla, G. H. A., 2002, "Computer simulation of a four stroke spark ignition engine", *Energy Conversion and Management*, v.43, n. 8, Maio, pp. 1043-1061.
- Alvin, K.F., Oberkampf, W.L., Diegert, K.V., Rutherford, B.M., 1998, "Uncertainty quantification in computational structural dynamics: a new paradigm for model validation", in: 16th International Model Analysis Conference, pp. 1191–1198.
- An, H., Wilhelm, W. E., Searcy, S. W., 2011, "Biofuel and Petroleum-based Fuel Supply Chain Research: A Literature Review", *Biomass and Bioenergy*, v. 35, n. 9, Outubro, pp. 3763-3774.
- Andrade E. T., Carvalho S. R. G. e Souza L. F., 2009, "Programa do proálcool e o etanol no Brasil", *Engevista*, v. 11, n. 2, pp. 127-136.
- ANFAVEA, 2015, "Carta da ANFAVEA", Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores, n. 345. Disponível em <<http://www.anfavea.com.br/>>. Acesso em: 21 jun. 2015.
- Antony J., Antony F. J., 2001. "Teaching the Taguchi Method to Industrial Engineers", *Work Study*, v. 50, n. 4, pp.141-149.
- Ashraf, M., Oladyshkin, S. e Nowak, W, 2013, "Geological store of CO₂: Application, feasibility and efficiency of global sensitivity analysis and risk assessment using the arbitrary polynomial chaos", *International Journal of Greenhouse Gas Control*.
- Babuska, I., Nobile, F. e Tempone, R., 2005, "A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data", *ICES Report*, pp. 05-47.
- Bishop, I.N., 1965. "Effects of Design Variables on Friction and Economy". *SAE technical paper*, v. 73, pp. 334–58.
- BNDS, CGEE, 2008, *Bioetanol de Cana-de-açúcar: Energia para o Desenvolvimento Sustentável*. 1 ed. Rio de Janeiro, Senac Rio.
- Borman, G., Nishiwaki, K. A., 1987, "Review of Internal Combustion Engine Heat Transfer", *Progress in Energy Combustion Sciences*, v. 13, pp 1-46.
- Brunt, M.F.J., Rai, H. e Emtage, A. L., 1998, "The Calculation of Heat Release Energy from Engine Cylinder Pressure Data". SAE Paper No. 981052.
- Bueno, J.P.V.M., 2011, *Análise Do Desempenho de Motores Diesel Utilizando Óleo Combustível Pesado e Combustível Destilado Marítimo*, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

- Bueno, J.P.V.M., 2011, Análise do Desempenho de Motores Diesel Utilizando Óleo Combustível Pesado e Combustível Destilado Marítimo, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil
- Bughardt, M. D., Harbach, J. A., 2002, *Engineering Thermodynamics*, 4 ed, Nova Iorque, HarperCollins College Publishers.
- Bungartz, H., Griebel, M., 2004, "Sparse Grids", *Acta Numerica*, v. 13, pp. 147–270.
- Cassandras, C.G. e Lafortune, S., 2008, Introduction to Discrete Event Systems, CETEM (Centro de Tecnologia Mineral), 2010, "Agrominerais para o Brasil", Ministério de Ciência e Tecnologia, Rio de Janeiro.
- Colaço, M. J., Teixeira, C. V. e Dutra, L. M., 2010a, "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., Teixeira, C. V. e Dutra, L. M., 2010b, "Thermal Analysis of a Diesel Engine Operating With Diesel–Biodiesel Blends", *Fuel*, v. 89, n. 12, pp. 3742-3752.
- CONAB, 2013, "Acompanhamento de safra brasileira : cana-de-açúcar, segundo levantamento, agosto/2013". Companhia Nacional de Abastecimento, Brasília.
- CONAB, 2015, "Acompanhamento de safra brasileira : cana-de-açúcar, primeiro levantamento, safra 2015/2016". Companhia Nacional de Abastecimento, Brasília.
- Costa, A. C. A., Junior, N. P. e Aranda, D. A., 2010, "The situation of biofuels in Brazil: New generation technologies", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v.14, pp.3041-3049.
- Deng, J., Anton, C. e Wong, Y.S., 2011, "Stochastic Collocation Method for Secondary Bifurcation of a Nonlinear Aerolastic System", *Journal of Sound and Vibration*, v. 330, pp. 3006-3023.
- DeVore, R., Iserles, A. e Süli, E., 2001, *Foundations of Computational Mathematics*, London Mathematical Society Lecture Note Series, v. 284, Cambridge University Press.
- Ebrahimi, R., 2010, "Performance optimization of a Diesel cycle with specific heat ratio", *Journal of American Science*, v. 6, pp. 157-161.
- Eichelberg, G., 1939, "Some New Investigations On Old Combustion Engine Problems", *Engineering*, v. 148, pp. 446-463.
- Eldred, M. S., Webster, C. G., Constantine, P., 2008, "Evaluation of non-intrusive approaches for Wiener-Askey generalized polynomial chaos". In *Proceedings of*

- the 10th AIAA Non-Deterministic Approaches Conference, number AIAA-2008-1892, Schaumburg, IL, v. 117, pp. 189.*
- Fares, S. T., 2007, *O pragmatismo do Petróleo: as relações entre o Brasil e o Iraque, de 1973 a 2007*. 266 f. Dissertação (Mestrado em Relações Internacionais) – Instituto de Relações Internacionais, Universidade de Brasília, Brasília, 2007.
- Ferguson, C. R., 1985, *Internal combustion engine applied thermosciences*. Nova Iorque, John Wiley and Sons; 1985.
- Ganapathy, T., Murugesan, K. e Gakkhar, R. P., 2009, “Performance Optimization Of Jatropa Biodiesel Engine Model Using Taguchi Approach”, *Applied Energy*, v. 86, n. 11, Novembro, pp. 2476-2486.
- Ganapathysubramanian, B. e Zabararas, N., 2007, “Sparse grid collocation schemes for stochastic natural convection problems”, *Journal of Computational Physics*, v. 225, n. 1, pp. 652-685.
- Gerstner, T. e Griebel, M., 2010, *Sparse Grids*, Encyclopedia of Quantitative Finance. John Wiley and Sons.
- Ghanem, R. G., Spanos, P. D., 1991, *Stochastic Finite Elements: A Spectral Approach*, Nova Iorque, Springer Verlag.
- Ghanem, R.G. and Dham, S., 1998. “Stochastic Finite Element Analysis for Multiphase Flow in Heterogeneous Porous Media”. *Transport in Porous Media*, v. 32, n. 2, pp. 239-262.
- Ghanem, R.G. and Spanos, P.D., 1990. “Polynomial Chaos in Stochastic Finite Element”. *Journal of Applied Mechanics*, v. 57, pp. 197-202.
- Ghanem, R.G., 1998. “Probabilistic Characterization of Transport in Heterogeneous Media”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 158, pp. 199-220.
- Ghanem, R.G., 1999. “Stochastic Finite Elements for Heterogeneous Media with Multiple Random non-Gaussian Properties”. *ASME Journal of Engineering Mechanics*, v. 125, n. 1, pp. 26-40.
- 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, pp. 297-312.
- Goldemberg, J., Coelho, S. T., Nastari, P. M., Lucon, O., 2004, Ethanol learning curve – the Brazilian experience. *Biomass and Bioenergy*, v. 26, pp. 301-304.
- Hardenberg, H. O., Hase, F. W., 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”, *SAE paper 790493, SAE Trans.* 88.

- He, J, Gao, S. e Gong, J., 2014, "A Sparse Grid Stochastic Collocation Method for Structural Reliability Analysis", *Structural Safety*, v. 51, pp. 29-34.
- Heywood, J. B., 1988, *Internal Combustion Engine Fundamentals*. 1 ed. Nova Iorque, McGraw-Hill, Inc.
- Hohenberg, G. F., 1979. "Advanced Approaches for Heat Transfer Calculations", *SAE Paper 790825*.
- Hussaini, M.Y., Kopriva, D.A. e Patera, A.T., 1989, "Spectral Collocation Methods", *Applied Numerical Mathematics*, v. 5, pp. 177-208.
- Jagadish, D., Puli, R. K. e Murthy, K. M., 2011, "Zero Dimensional Simulation of Combustion Process of a DI Diesel Engine Fuelled With Biofuels", *International Journal of Mechanical and Materials Engineering*, v. 2, n. 1, pp. 18-24.
- Jakeman, J., Eldred, M. e Xiu, D., 2010, "Numerical Approach for Quantification of Epistemic Uncertainty", *Journal of Computational Physics*, v. 229, pp. 4648–4663.
- Kamrani, M, Hosseini, S. M., 2012, "Spectral collocation method for stochastic Burgers equation driven by additive noise". *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 82, pp. 1630–1644.
- Kohlhepp, G., 2010, "Análise da Situação da Produção de Etanol e Biodiesel no Brasil". Estudos Avançados, São Paulo , v. 24, n. 68, p. 223-253.
- Komninos, N. P. e Rakopoulos, C. D., 2012, "Modeling HCCI Combustion of Biofuels: A Review", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 16, n. 3, Janeiro, pp. 1588-1610.
- Lin, G., Tartakovsky, A.M. e Tartakovsky, D.M., 2010, "Uncertainty Quantification via Random Domain Decomposition and Probabilistic Collocation on Sparse Grids", *Journal of Computational Physics*, v. 229, pp. 6995-7012.
- Loeven, G.J.A., Witteveen, J.A.S., Bijl, H., 2006, "Efficient Uncertainty Quantification Using a Two-Step Approach with Chaos Collocation". *European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD*, Egmond aan Zee, The Netherlands.
- Lopes, G. B. R., 2012, *Choques que Mudaram o Mundo: Uma Análise dos Choques do Petróleo e dos Choques das Commodities*. 54 f. Monografia apresentada ao Departamento de Economia da PUC-RJ para obtenção do grau de bacharel em Economia.
- Lounici, M.S., Loubar, K., Balistrrou, M. e Tazerout, M., 2010, "Investigation on Heat Transfer Evaluation for a More Efficient Two-zone Combustion Model in the Case of Natural Gas SI Engines". *Journal of Applied Thermal Engineering*, v. 31, pp.319-328.

- MAN Diesel & Turbo, 2010, *Manual MAN L16/24: Instruction Manual*, 1ª ed., Alemanha.
- Mathelin, L. e Hussaini, M.Y., 2003, “A Stochastic Collocation Algorithm for Uncertainty Analysis”. Technical Report NAS 1.26:212153; NASA/CR-2003-212153, NASA Langley Research Center.
- Melo, T. C. C., 2007, *Modelagem Termodinâmica de um Motor do Ciclo Otto Tipo Flex-Fuel, Funcionando com Gasolina, Álcool e Gás Natural.*, Brasil. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.
- Melo, T.C.C., 2006, “Incerteza de Medição em Ensaios de Emissões Veiculares - Proposta de Metodologia de Cálculo”, INMETRO – Fórum de discussão de ensaios de proficiência, Maio, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, www.inmetro.gov.br.
- Miyamoto, N., Chikahisa, T., Murayama, T., Sawyer, R., 1985. “Description and analysis of diesel engine rate of combustion and performance using Wiebe’s functions”, *SAE International Congress and Exposition*, Detroit, MI, SAE paper 850107.
- MME, 2008, “Tecnologias de Energias Renováveis: Soluções Energéticas para a Amazônia”, Ministério de Minas e Energia, 1ª ed., Brasília.
- MME, 2015, “Boletim Mensal dos Combustíveis Renováveis”, Ministério de Minas e Energia, 85ª ed., Brasília.
- Mollenhauer, K. e Tschöcke, H., 2010. *Handbook of Diesel Engines*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. DOI 10.1007/978-3-540-89083-6
- Nieminen, J., Dincer, I., 2010, “Comparative Exergy Analyses of Gasoline and Hydrogen Fuelled ICEs”, *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 35, pp. 5124-5132.
- Nigam, P. S., Singh, A., 2011, “Production of Liquid Biofuels From Renewable Resources”, *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 37, n. 1, Fevereiro, pp. 52-68.
- Nobile, F., Tempone, R, Webster, C. G., 2007, “A Sparse Grid Stochastic Collocation Method for Partial Differential Equations with Random Input Data”, *SIAM Journal of Numerical. Analysis*. v .46, n. 5, pp 2309–2345.
- Nürnberg, G., 1996, “Multivariate Approximation and Splines”, International Conference on Multivariate Approximation and Splines, Setembro, Alemanha.
- Payri, F., Olmeda, P., Martín, J. E García, A., 2011, “A Complete 0D Thermodynamic Predictive Model For Direct Injection Diesel Engines”, *Applied Energy*, v. 88, n. 12, Junho, pp. 4632-4641.

- Pearson, E. S., 1963, "Some problems arising in approximating to probability distributions using moments". *Biometrika*, v. 50, pp. 95–112.
- Potter, M. C., Somerton, C. W., 1993, *Schaum's Outline Of Thermodynamics For Engineers*, 2 ed, Nova Iorque, McGraw-Hill, Inc.
- Pulkrabek, W. W., 1997, "Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine", 2 ed., Pearson Prentice Hall.
- Rakopoulos, C. D., 1993. "Evaluation Of A Spark Ignition Engine Cycle Using First And Second Law Analysis Techniques", *Energy Conversion and Management*, v. 34, n. 12, pp. 1299–1314.
- Rakopoulos, C. D., Antonopoulos, K. A., Rakopoulos, D. C., 2007. "Development and application of multi-zone model for combustion and pollutants formation in direct injection diesel engine running with vegetable oil or its bio-diesel", *Energy Conversion and Management*, v. 48, pp. 1881-1901.
- Ramadhas, A. S., Jayaraj, S. e Muraleedharan, C., 2006, "Theoretical Modeling And Experimental Studies On Biodiesel-Fueled Engine", *Renewable Energy*, v. 31, n. 11, Setembro, pp. 1813-1826.
- Ramos, J. J., 1989. *Internal Combustion Engine Modeling*, Hemisphere Publishing Corporation, EUA.
- Riahi, H., Bressollette, Ph. E Chateauneuf, A., 2010, "Random Fatigue Crack Growth in Mixed Mode by Stochastic Collocation Method", *Engineering Fracture Mechanics*, v. 77, pp. 3292-3309.
- Rocha, A. M., Campos, F. A. A. e Cunha, M. C., 2012, "O método de Galerkin Estocástico e Equação Diferencial de Transporte Linear Estocástica", *Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*, pp. 194-200.
- Saldiva, P. H. N., Andrade M. F., Miraglia S. G. E. K. e André P. A., 2009, "Etanol e saúde humana: uma abordagem a partir das emissões atmosféricas". Disponível em: http://www.unica.com.br/downloads/estudosmatrizenergetica/pdf/Matriz_Social_Saldiva4.pdf. Acessado em: 11 de maio de 2015.
- Sathler, D., Reis, R., 2010, "Mudanças Climáticas Globais: as Dimensões Humanas em Perspectiva", *Revista Brasileira de Estudos Populacionais*, v. 27, n. 1, Junho, pp. 237-238.
- Sepahvand, K e Marburg, S, 2013, "On construction of uncertain material parameter using generalized polynomial chaos expansion from experimental data", *Symposium on Multiscale Problems in Stochastic Mechanics*, v.6, pp. 4-17.
- Serrano, J.R., Climent, H., Guardiola, C. e Piqueras, P., 2009, "Methodology for characterisation and simulation of turbocharged diesel engines combustion

- during transient operation. Part 2: phenomenological combustion simulation”. *Applied Thermal Engineering*, v. 29, pp.150-158.
- Sezer, I, Bilgin, A., 2012, “Effects Of Charge Properties On Exergy Balance In Spark Ignition Engines”, *Fuel*, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2012.09.078>.
- Shudo, T., Suzuki, H., 2002, “Applicability of heattransfer equations to hydrogen combustion”, *Society of Automotive Engineers of Japan*, v. 23, n. 3, July, pp. 303-308.
- Souza, M.V.C, Colaço, M.J. e Leiroz, A.J.K., 2014, “*Application of the generalized Polynomial Chaos Expansion to the Simulation of an Internal Combustion Engine with Uncertainties*”, *Fuel*, v. 134, pp. 358–367.
- Suarez, P. A. Z. e Meneghetti, S. M. P., 2007, “70° Aniversário do Biodiesel em 2007: Evolução Histórica e Situação Atual no Brasil”, *Química Nova*, v. 30, n. 8, pp. 2068-2071.
- Taheripour, F., Hertel T. W., Tyener W. E., Beckman J. F. e Birur D. K., 2010, “Biofuels and their by-products: Global economic and environmental implications”, *Biomass and bioenergy*, v. 34, pp. 278-289.
- Távora, F. L., 2011, “História e Economia dos Biocombustíveis no Brasil – Textos para discussão n. 89”, Centro de Estudos da Consultoria do Senado, Senado federal, Abril.
- Trcala, M, 2014, “Spectral stochastic modeling of uncertainties in nonlinear diffusion problems of moisture transfer in wood”, *Appl. Math. Modell.*
- Vieira Filho, A. A. e Ramos, P., 2006, “Proálcool e Evidências de Concentração na Produção e Processamento de Cana-de-açúcar”, *Informações Econômicas*, v. 36, n. 7, Julho, pp. 48-61.
- Vuuren, C. M. V., Thiart, G. D. e Taylor, A. B., 2002, “Computer Simulation of Internal Combustion Engine Flow Processes”, *R&D Journal*, v. 18, n. 2, Julho, pp. 37-41.
- Waldheim, F. V., Colaço, M. J., Leiroz, A. J. L., 2011, “*Numerical Simulation of the Performance of a Marina Engine Using Diesel and Blends of Marine Diesel with Ethanol*”. In: 21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering, Natal. Proceedings of the 21st Brazilian Congress of Mechanical Engineering, 2011.
- Waldvogel, J., 2003, “Fast Construction of the Fejér and Clenshaw-Curtis Quadrature Rules”, *BIT Numerical Mathematics*, v. 43, n. 1, pp. 001-018.

- Wan, e Karniadakis, G., 2006, “Long-term behavior of polynomial chaos in stochastic flow simulations”, *Computer. Methods in Applied. Mechanics. Engineering*, v.195, pp. 5582–5596.
- Wiener, N., 1938, “The Homogeneous Chaos”, *American Journal of Mathematics*, v. 60, pp. 897-936.
- Woschni, G., 1967, “A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine”, *SAE Trans*, v. 76, pp. 3065-3083.
- Xiu, D. e Hesthaven, J.S., 2005, “High-Order Collocation Methods for Differential Equations with Random Inputs”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 27, pp. 1118–1139
- Xiu, D. e Karniadakis, G., 2002, “Modeling uncertainty in steady state diffusion problems via generalized polynomial chaos”, *Computer. Methods in Applied. Mechanics. Engineering.*, v.191, pp. 4927-4948.
- Xiu, D. e Karniadakis, G., 2002, “The Wiener–Askey Polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations”, *SIAM Journal on Scientific Computing*, v. 24, n. 2, pp. 619-644.
- Xiu, D. e Karniadakis, G., 2003, “A new stochastic approach to transiente heat conduction modeling with uncertainty”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v.46, pp. 4681-4693.
- Xiu, D. e Karniadakis, G., 2004, “Supersensitivity due to uncertain boundary conditions”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v.61, pp. 2114-2138.
- Xiu, D. e Karniadakis, G., 2006, “Modeling uncertainty in flow simulations via generalized polynomial chaos”, *Journal of Computational Physics*, v.187, pp. 137-167.
- Xiu, D., 2009, “Fast Numerical Methods for Stochastic Computations: A Review”, *Comm. Comput. Phys.*, v. 5, pp. 242-272.
- Xiu, D., 2010, *Numerical Metholds for Stochastic Computations: A Spectral Method Approach*, Princeton University Press.
- Xiu, D., Karniadakis, G. M., 2002, “The Wiener-Askey Polynomial Chaos for Stochastic Differential Equations”, *SIAM J. Sci. Comput.*, v. 24, n. 2, pp. 619–644.
- Xiu, D., Karniadakis, G. M., 2003, “Modeling Uncertainty In Flow Simulations Via Generalized Polynomial Chaos”, *Journal of Computational Physics*, v. 187, pp. 137-167.

Zarante, P. H. B., 2007, *Análise de Aldeídos por Cromatografia a Gás na Exaustão de um Motor de Combustão Interna*. Dissertação de M.Sc., PUC, Belo Horizonte, MG, Brasil.

APÊNDICE A

A.1 Simulação de Monte Carlo

A técnica de simulação de Monte Carlo é uma referência clássica e tem por principal característica a simplicidade de aplicação. Além disso, por meio desse método pode-se solucionar numericamente modelos complexos que possuam entradas aleatórias (Mathelin e Hussaini, 2003).

Considera-se o método MC como “referência” por contabilizar a incerteza de forma a não requerer quaisquer aproximações nem suposições (Mathelin e Hussaini, 2003). A principal vantagem está na taxa de convergência que não depende do número de variáveis aleatórias independentes. Com tais características, justifica-se sua aplicação em inúmeras áreas de pesquisa. No entanto, sua aplicação é inviável para grandes problemas, pois pode requerer milhares de simulações, resultando em um custo computacional proibitivo (Mathelin e Hussaini, 2003).

Esse método converge assintoticamente a uma taxa equivalente a $1/\sqrt{K}$ para uma quantidade K de realizações, o que é relativamente lento (Xiu e Hesthaven, 2005). Mas, por outro lado, independe da dimensionalidade do espaço randômico (Xiu e Hesthaven, 2005).

Essa técnica clássica de quantificação de incerteza é a maneira mais natural de obter uma resposta estocástica e sua implementação segue os seguintes passos (Loeven *et al.*, 2006):

1. Tome um valor a partir do domínio $[0, 1]$, isto é, realize a amostragem;
2. Calcule o valor da variável randômica usando sua função de distribuição;
3. Solucione o problema como se fosse determinístico;
4. Repita as etapas 1, 2 e 3 conforme o tamanho K da amostra;
5. Obtenha as propriedades estatísticas do conjuntos de soluções.

A média ou valor esperado (E) para temperatura e pressão pode ser obtido pelas expressões a seguir em cada ângulo do virabrequim (θ_i),

$$E[T(\theta_i)] = \frac{1}{\kappa} \sum_{j=1}^{\kappa} T_j(\theta_i) \quad (\text{A.1})$$

$$E[P(\theta_i)] = \frac{1}{\kappa} \sum_{j=1}^{\kappa} P_j(\theta_i) \quad (\text{A.2})$$

Também para um ângulo fixo (θ_i) determina-se a variância da temperatura e da pressão,

$$T_{\sigma^2}(\theta_i) = \frac{1}{\kappa} \sum_{j=1}^{\kappa} \{T_j(\theta_i) - E[T(\theta_i)]\}^2 \quad (\text{A.3})$$

$$P_{\sigma^2}(\theta_i) = \frac{1}{\kappa} \sum_{j=1}^{\kappa} \{P_j(\theta_i) - E[P(\theta_i)]\}^2 \quad (\text{A.4})$$

APÊNDICE B

B.1 Simulação sob incertezas do motor operando no ciclo Otto por meio do PCg

Nessa se encontra o código computacional elaborado no software comercial Mathematica® versão 9.0.1.0, a fim de simular sob incertezas o funcionamento do motor operando no ciclo Otto e com incerteza, seguindo uma distribuição Uniforme, na correlação de Wiebe.

Dados de entrada

```
θic = -0.05667; (*[rad]*) (*início da combustão*)
Δθ = 0.21222; (*[rad]*) (*duração da combustão*)
Tp = 378.15; (*[K]*) (*temperatura na parede*)
P1 = 66.78 * 103; (*[Pa]*)
T1 = 312.15; (*[K]*)
Var = 85.07; (*[kg/h]*)
Rot = 2500  $\frac{2\pi}{60}$ ;
PCI = 24.804 * 106; (*[MJ/kg]=[1000000 J/kg]*)
AC = 8.417 (*A/C estequiométrica*);
a = 5; (*parâmetro ajustável da função de Wiebe*)
m = 2; (*parâmetro ajustável da função de Wiebe*)
k̄ = 1.3404; (*razão entre calores específicos*)
```

Parâmetros da Geometria do motor [m]

```
Sp = 86.4 * 10-3;
L = 144 * 10-3;
R =  $\frac{Sp}{2}$ ; (* $\frac{2}{\pi} \frac{Vd}{d^2}$ *)
d = 81.01 * 10-3;
r = 11;
Vd = 0 (*[10-6cm3]=[m3]*);
```

Combustão

```
ηc = 0.87; (*eficiência da combustão*)
mAR =  $\frac{Var}{0.5 * 3600 * \eta_c} * \frac{1}{Rot}$ ; (*massa de ar*)
mCOMB =  $\frac{mAR}{AC}$ ; (*massa de combustível*)
mAC = mCOMB + mAR;
QTotal = ηc * mCOMB * PCI; (*energia liberada para o sistema*)
```

Equações relativas a geometria

$$S[\theta] = R \cos[\theta] + \sqrt{L^2 - R^2 \sin^2[\theta]};$$
$$V[\theta] = \frac{\pi d^2}{4} \left(L + R - S[\theta] + \frac{2R}{r-1} \right);$$
$$A[\theta] = \pi d \left(\frac{d}{2} + L + R - S[\theta] + \frac{2R}{r-1} \right);$$

Balço da reação química

Combustível equivalente



Massa atômica em g/mol

$$nC = 2.15; nH = 6.62; nO = 1.23;$$

$$b = nC; c = nH / 2; a = \frac{2 * nC + nH / 2 - 2 * nO}{2};$$

$$nN_2 = 7.52 * a;$$

Dados no fechamento da válvula de admissão

$$V1 = V[-164 \pi / 180];$$

$$Mm = mCOMB + mAR; (*massa da mistura*)$$

$$Rg = 8.314472; (* \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] *)$$

$$COMBmol = nC * 12.01 + nH * 1.008 + nO * 16; (* \left[\frac{g}{mol} \right] *)$$

$$ARmol = nO * 2 * 16 + nN_2 * 14.007; (* \left[\frac{g}{mol} \right] *)$$

$$Mmol = COMBmol + ARmol; (*massa molecular da mistura*)$$

$$nM = nC + nH + nO + 2 * a * nO + nN_2 (*n^\circ \text{ de mols da mistura}*);$$

$$\bar{R} = \frac{Rg}{Mmol} (* \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] \left[\frac{mol}{g} \right] = \left[\frac{J}{K \cdot g} \right] *);$$

$$T0 = T1;$$

Solução estocástica

```
(*===== DADOS DE ENTRADA ===== *)  
infINT = -1; supINT = +1; grau = 3; erro = 0.01; caso = "uniforme";
```

■ PDF - Função de Densidade de Probabilidade

```
Clear[ξ];
```

```
w[ξ_] = PDF[UniformDistribution[{min, max}], ξ] /. {μ → erro, min → infINT, max → supINT};
```

```
w[ξ] = w[ξ][[1]][[1]][[1]];
```

■ Cálculo dos N + 1 termos na expansão

Observação: "grau" é o grau do polinômio e "dim" é a dimensão da variável aleatória

$$Np = \frac{(grauP + dim)!}{grauP! dim!} /. \{grauP \rightarrow grau, dim \rightarrow 1\};$$

```
Print["A expansão terá ", Np + 1, " termos."]
```

■ Polinômio ortogonal de Legendre

```
(*Polinômio de Laguerre*)
```

```
Clear[i]; expr = Array[, Np + 1];
```

```
p0[ξ_] = 1; expr[[1]] = 1; ψ1[ξ] = 1;
```

```
p1[ξ_] = ξ; expr[[2]] = ξ; ψ2[ξ] = ξ;
```

$$p_{i_}[\xi_]:= \text{Expand}\left[\frac{1}{i} \left((2i-1) \xi p_{i-1}[\xi] - (i-1) p_{i-2}[\xi] \right)\right]$$

```
For[i = 2, i ≤ Np + 1, i++, expr[[i]] = pi[ξ] /; grau > 1;
```

```
For[j = 2, j ≤ Np + 1, j++,
```

```
  {ψj[ξ_] = Expand[expr[[j]] / Last[CoefficientList[expr[[j]], ξ]]} /;
```

```
  grau > 1; Clear[j];
```

```

For[j = 1, j ≤ Np + 1, j++, Print[ψj[ξ]]; Clear[j]

(*Polinômio de Legendre *)
expr = Table[LegendreP[i - 1, ξ] /
  Last[CoefficientList[LegendreP[i - 1, ξ] // Expand, ξ] // Expand, {i, 1, 11}];
For[j = 1, j ≤ Np + 1, j++, {ψj[ξ_] = expr[[j]]}; Clear[j]
(*ψ é o polinômio e j é o grau*)
For[j = 1, j ≤ Np + 1, j++, Print[ψj[ξ]];
Clear[j, i]

```

■ **Coefficientes determinísticos: e_{ijk}**

```
e[i_, j_, l_] = Integrate[ψi[ξ] ψj[ξ] ψl[ξ] w[ξ], {ξ, infINT, supINT}]
```

■ **Produto interno**

```
prodint[x_] = ∫infINTsupINT x ψ1[ξ] w[ξ] dξ
```

■ **Sistema de EDO**

■ **Fração mássica de combustível queimado (Eq. de Wiebe estocástica)**

```
Wiebe[θ_] = 1 - Exp[-a ( (θ - θic) / Δθ )m+1];
```

```
x[θ_] = Piecewise[{{D[Wiebe[θ], θ], θic ≤ θ}, 0}
```

```
Clear[μ]
```

$$x_1[\theta] = \frac{1}{\int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} \psi_1[\xi] \psi_1[\xi] w[\xi] d\xi} \left(x[\theta] \left(\int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} 1 \psi_1[\xi] w[\xi] d\xi + \mu * \int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} \xi \psi_1[\xi] w[\xi] d\xi \right) \right) / . \mu \rightarrow \text{erro}$$

■ **Sistema de equações : equações de governo e condição inicial**

```
Clear[i, j, k, l]
```

```
lista = {
```

$$\frac{1}{\bar{k} - 1} \sum_{i=1}^{Np+1} \sum_{j=1}^{Np+1} T_i'[\theta] P_j[\theta] e[i, j, l] ==$$

$$\frac{Q_{\text{Total}}}{V[\theta]} \sum_{i=1}^{Np+1} \sum_{k=1}^{Np+1} T_i[\theta] x_k[\theta] e[i, k, l] - \frac{V'[\theta]}{V[\theta]} \sum_{i=1}^{Np+1} \sum_{j=1}^{Np+1} T_i[\theta] P_j[\theta] e[i, j, l],$$

$$V[\theta] P_1'[\theta] + \bar{k} V'[\theta] P_1[\theta] == (\bar{k} - 1) Q_{\text{Total}} x_1[\theta],$$

$$T_1[\theta_0] == \frac{T_0}{\int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} \psi_1[\xi] \psi_1[\xi] w[\xi] d\xi} \int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} \psi_1[\xi] w[\xi] d\xi + 0.0000001 / .$$

```
{θ0 → -164 π / 180, T0 → T1},
```

$$P_1[\theta_0] == \frac{P_0}{\int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} \psi_1[\xi] \psi_1[\xi] w[\xi] d\xi} \int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} \psi_1[\xi] w[\xi] d\xi + 0.0000001 / .$$

```
{θ0 → -164 π / 180, P0 → P1}
```

```
};
```

■ **Montagem do sistema de EDO**

```
Clear[i, j, l];
```

```
eqns = {};
```

```
For[l = 1, l ≤ Np + 1, l++, {eqns = Append[eqns, lista]};];
```

```
eqns = eqns // Flatten;
```

■ Resolução do sistema

Variáveis dependentes

```
vars = Table[Ti[θ], {i, 1, Np + 1}];
vars = Append[vars, Table[Pi[θ], {i, 1, Np + 1}]] // Flatten
TempoComputacional =
Timing[
  solset = NDSolve[eqns, vars, {θ, -164 π / 180, 146 π / 180},
    Method -> {"EquationSimplification" -> "Solve"}] // Flatten
][[
  1]];
(*Atribuir a solução encontrada para cada coeficiente Ti e Pi*)
For[i = 1, i ≤ Np + 1, i++, {Ti[θ_] = solset[[i]][[2]]};];
For[i = 1, i ≤ Np + 1, i++, {Pi[θ_] = solset[[Np + 1 + i]][[2]]};];
```

Pós-processamento: Média e variância da solução

```
integral = Table[ $\int_{\text{infINT}}^{\text{supINT}} \psi_i[\xi]^2 w[\xi] d\xi$ , {i, 1, Np + 1}];
Tav[θ_] = T1[θ]; (*Temperatura média*)
Tvar[θ_] =  $\sum_{i=2}^{Np+1} (T_i[\theta])^2 \text{integral}[[i]]$ ; (*Variância da temperatura*)
Pav[θ_] =  $\frac{P_1[\theta]}{10^6}$ ; (*Pressão média*)
Pvar[θ_] =  $\sum_{i=2}^{Np+1} \left( \frac{1}{10^6} P_i[\theta] \right)^2 \text{integral}[[i]]$ ; (*variância da Pressão*) (**)
```

APÊNDICE C

C.1 Simulação sob incertezas do motor operando no ciclo Otto por meio do MCE

Nessa se encontra o código computacional elaborado no software comercial Mathematica® versão 9.0.1.0, a fim de simular sob incertezas o funcionamento do motor operando no ciclo Otto aplicando o MCE ao Modelo 5, onde as incertezas seguem uma distribuição Uniforme.

Dados de entrada

```
In[1]:= tinicio = SessionTime[];

SetDirectory[NotebookDirectory[]];
dados = Import["experimento_alcool_2500rpm_75Nm.dat"];
eic = -0.05667; (*[rad]*)(*início da combustão*)
Δθ = 0.21222; (*[rad]*)(*duração da combustão*)
Tp = 378.15; (*[K]*)(*temperatura na parede*)
P1 = 66.78 * 103; (*[Pa]*)
T1 = 312.15; (*[K]*)
Var = 85.07; (*[kg/h]*)

Rot = 2500  $\frac{2\pi}{60}$ ;

PCI = 24.804 * 106; (*[MJ/kg]=[1000000 J/kg]*)
AC = 8.417(*A/C estequiométrica*);
a = 5; (*parâmetro ajustável da função de Wiebe*)
m = 2; (*parâmetro ajustável da função de Wiebe*)
```

Parâmetros da Geometria do motor [unidades em metro]

```
In[7]:= Sp = 86.4 * 10-3;
L = 144 * 10-3;
R =  $\frac{Sp}{2}$ ; (* $\frac{2 Vd}{\pi d^2}$ *)
d = 81.01 * 10-3;
r = 11;
Vd = 0 (* [10-6cm3] = [m3] *);

In[13]:= k[θ_] = 1.3404;
x[θ_] = 0;

Outros parâmetros

In[15]:= ηc = 0.87;

mAR =  $\frac{Var}{0.5 * 3600 * ηc} * \frac{1}{Rot}$ ;
mCOMB =  $\frac{mAR}{AC}$ ;
mAC = mCOMB + mAR;
QTotal = ηc * mCOMB * PCI;
```

Equações relativas a geometria

$$\ln[20]= S[\theta_{-}] = R \cos[\theta] + \sqrt{L^2 - R^2 \sin[\theta]^2};$$

$$V[\theta_{-}] = \frac{\pi d^2}{4} \left(L + R - S[\theta] + \frac{2R}{r-1} \right);$$

$$A[\theta_{-}] = \pi d \left(\frac{d}{2} + L + R - S[\theta] + \frac{2R}{r-1} \right);$$

Combustível equivalente



Elemento químico	H	C	O	N	S	Fe
Massa atômica	1,008	12,01	16	14,007	32,06	55,84

Combustível Equivalente	$C_{2,15} H_{6,62} O_{1,23}$
-------------------------	------------------------------

Massa atômica em g / mol

Balço da reação química

$$\ln[23]= nC = 2.15;$$

$$nH = 6.62;$$

$$nO = 1.23;$$

$$b = nC; c = nH / 2; a = \frac{2 * nC + nH / 2 - 2 * nO}{2};$$

$$nN_2 = 7.52 * a;$$

Dados no fechamento da válvula de admissão

$$V1 = V[-164 \pi / 180];$$

$$Mm = mCOMB + mAR;$$

$$Rg = 8.314472; (* \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] *);$$

$$COMBmol = nC * 12.01 + nH * 1.008 + nO * 16; (* \left[\frac{g}{mol} \right] *);$$

$$ARmol = nO * 2 * 16 + nN_2 * 14.007; (* \left[\frac{g}{mol} \right] *);$$

$$Mmol = COMBmol + ARmol; (*massa molecular da mistura*);$$

$$nM = nC + nH + nO + 2 * a * nO + nN_2 (*n^{\circ} de mols da mistura*);$$

$$\bar{R} = \frac{Rg}{Mmol} (* \left[\frac{J}{mol \cdot K} \right] \left[\frac{mol}{g} \right] = \left[\frac{J}{K \cdot g} \right] *);$$

$$\ln[36]= woschni[\theta_{-}] = 0.013 d^{-0.2} (P[\theta] / 1000)^{0.8} T[\theta]^{-0.53} (2.28 * 2 * Sp * Rot)^{0.8};$$

$$fcor = 1.5267;$$

$$Qp[\theta] = \frac{woschni[\theta] A[\theta]}{Rot} (T[\theta] - Tp) // FullSimplify;$$

$$\ln[39]= T0 = T1;$$

Solução Análítica

Equações relativas a geometria

$$\text{In[40]:= } S[\theta_] = R \cos[\theta] + \sqrt{L^2 - R^2 \sin[\theta]^2};$$

$$V[\theta_] = \frac{\pi d^2}{4} \left(L + R - S[\theta] + \frac{2R}{r-1} \right);$$

Solução analítica da pressão e da temperatura

$$\text{In[42]:= } T_{\text{an}}[\theta_] = T0 \left(\frac{V[-164 \pi / 180]}{V[\theta]} \right)^{k[\theta]-1};$$

$$P_{\text{an}}[\theta_] = P1 \left(\frac{V[-164 \pi / 180]}{V[\theta]} \right)^{k[\theta]};$$

Solução numérica

Equações principais

$$\text{In[44]:= } \text{eq3} = \frac{1}{k[\theta] - 1} \left(\frac{1}{T[\theta]} T'[\theta] - \frac{1}{k[\theta] - 1} k'[\theta] \right) =$$

$$\frac{1}{P[\theta] V[\theta]} (Q_{\text{Total}} x'[\theta] - f_{\text{cor}} Q_P[\theta]) - \frac{1}{V[\theta]} V'[\theta];$$

$$\text{eq4} = \frac{1}{k[\theta] - 1} \left(P[\theta] V'[\theta] + V[\theta] P'[\theta] - \frac{P[\theta] V[\theta]}{k[\theta] - 1} k'[\theta] \right) =$$

$$(Q_{\text{Total}} x'[\theta] - f_{\text{cor}} Q_P[\theta]) - P[\theta] V'[\theta];$$

Solução do sistema de EDO para $-2.61799 < \theta < 2.79253$ [rad]

`In[46]:= system = {eq3, eq4, T[-164 π / 180] == T0, P[-164 π / 180] == P1};`

`sol = NDSolve[system, {T, P}, {θ, -164 π / 180, 146 π / 180}];`

`P0_num[θ_] = P[θ] /. sol;`

`T0_num[θ_] = T[θ] /. sol;`

`In[50]:= Plot[`

$$\frac{0.013 d^{-0.2} (P0_{\text{num}}[\theta \pi / 180])^{0.8} T0_{\text{num}}[\theta \pi / 180]^{-0.53} (2.28 * 2 * Sp * Rot)^{0.8} A[\theta \pi / 180]}{\text{Rot}}$$

`(T0_num[θ π / 180] - Tp), {θ, -150, 140}, Frame → True]`

Comparação da solução analítica com a numérica

Curva de pressão

`In[51]:= Plot[P0_num[θ π / 180] / 1 000 000, {θ, -150, 150}]`

```
In[52]:= Needs["PlotLegends`"]
Plot[
  {P0_num[θ π / 180] / 1 000 000, P_an[θ π / 180] / 1 000 000}, {θ, -150, 150},
  PlotRange → {0, 1.7}, Frame → True,
  PlotStyle → {{Black, Thick}, {Gray, Dashed, Thick}},
  FrameLabel → {"θ [deg]", "P [bar]"}, RotateLabel → False,
  PlotLegend → {"Numérico", "Analítico"}, LegendPosition → {0.2, 0.2},
  LegendSize → 0.8, LegendTextSpace → 4.5, LegendShadow → None]
```

Curva de temperatura

```
In[54]:= Needs["PlotLegends`"]
Plot[
  {T0_num[θ π / 180], T_an[θ π / 180]}, {θ, -150, 160},
  PlotRange → All, Frame → True,
  PlotStyle → {{Black, Thick}, {Gray, Dashed, Thick}},
  FrameLabel → {"θ [deg]", "P [bar]"}, RotateLabel → False,
  PlotLegend → {"Numérico", "Analítico"}, LegendPosition → {0.2, 0.2},
  LegendSize → 0.8, LegendTextSpace → 4.5, LegendShadow → None]
```

Simulação com combustão e com transferência de calor

Simplificações

```
In[56]:= Clear[x, Vd, woschni];
k = 1.3; (*k médio no intervalo [1.25 , 1.4]*)
```

Combustão - Equação de Wiebe simples

Parâmetros e Fração mássica de combustível

```
In[58]:= Wiebe[θ_] = 1 - Exp[-a ( (θ - θic) / Δθ )m+1];
x[θ_] = Piecewise[{{0, θ < θic}, {Wiebe[θ], θic ≤ θ}}, 1];
x'[θ] // Simplify
```

Considerações para a combustão e transferência de calor

```

ln[61]:= Vd = 1781 * 10^-6; (*[cm³]=[10^-6m³]*)
Vp = 2 Sp Rot; (*Sp [m] e Rot [rad/s]*)
C2[θ_] = Piecewise[{{3.24 * 10^-3, θ ≥ θic}}, 0];

Vg[θ_] = 2.28 Vp + C2[θ] (P[θ] - P0num[θ][[1]]) Vd  $\frac{T1}{P1 V1}$ ;
woschni[θ_] = 0.013 d^-0.2 (P[θ] / 1000)^0.8 T[θ]^-0.53 (Vg[θ])^0.8;
fcor = 1.5267;
Qp[θ] =  $\frac{woschni[\theta] A[\theta]}{Rot}$  (T[θ] - Tp) // FullSimplify;

```

Pontos de Colocação e pesos correspondentes

```

ln[68]:= SetDirectory[NotebookDirectory[]];
(*O DIRETÓRIO É O MESMO DO ARQUIVO DO MATHEMATICA*)

ln[69]:= level = 3; ρ = {0.2, 0.5, 0.07692307692307682, 1.25};
(*taxa percentual de incerteza*)

ln[70]:= strX = OpenRead@FileNameJoin@{"cc_d4_level" <> ToString /@ {level} <> "_x.txt"};
(*LER PONTOS DE COLOCAÇÃO A PARTIR DO ARQUIVO GERADO PELO FORTRAN*)
Ψ = ReadList[strX, {Number, Number, Number, Number}];

ln[72]:= strW = OpenRead@FileNameJoin@{"cc_d4_level" <> ToString /@ {level} <> "_w.txt"};
(*LER PESOS A PARTIR DO ARQUIVO GERADO PELO FORTRAN*)
Ω = ReadList[strW, Number];

ln[74]:= npts = Length[Ψ]

ln[75]:= SomaPesos =  $\sum_{i=1}^{npts} \Omega[[i]]$ 

ln[76]:= Ω =  $\frac{\Omega}{SomaPesos}$ ;
 $\sum_{i=1}^{npts} \Omega[[i]]$ 

ln[78]:= (*Discretização do domínio*)
numpoints = 620; (*quantidade de pontos*)
θf = 146; (*θ final*)
θi = -164; (*θ inicial*)
δθ = (θf - θi) / numpoints // N (*passo*);
θrad = Table[(θi + δθ i) π / 180, {i, 1, numpoints}];
θdeg = Table[θi + δθ i, {i, 1, numpoints}];

```

Solução numérica

```

In[84]:= (*Incerteza em: k, x'[θ], fcor Qp[θ] *)
Monitor[
Do[{{κ1 = Ξ[[it]][[1]]; κ2 = Ξ[[it]][[2]]; κ3 = Ξ[[it]][[3]]; κ4 = Ξ[[it]][[4]];
(*equações principais*)(*κ → ponto de colocação ;
θ → grau de incerteza *)
x[θ_] = Piecewise[{{0, θ < θic},
{1 - Exp[-a (1 + κ1 ρ[[1]]) ( (θ - θic) / Δθ )m (1 + κ2 ρ[[2]) + 1], θic ≤ θ}}, 1];
eq5 =  $\frac{1}{k (1 + \kappa_3 \rho[[3]]) - 1} \left( \frac{T'[\theta]}{T[\theta]} \right) =$ 
 $\frac{1}{P[\theta] V[\theta]} (Q_{Total} x'[\theta] - fcor Qp[\theta] (1 + \kappa_4 \rho[[4]]) - \frac{1}{V[\theta]} v'[\theta]);$ 
eq6 =  $\frac{1}{k (1 + \kappa_3 \rho[[3]]) - 1} (P[\theta] V'[\theta] + V[\theta] P'[\theta]) =$ 
 $(Q_{Total} x'[\theta] - fcor Qp[\theta] (1 + \kappa_4 \rho[[4]]) - P[\theta] V'[\theta]);$ 
(*Solução do sistema de EDO para -2.61799 < θ < 2.79253 [rad]*)
system = {eq5, eq6, T[-164 π / 180] == T0, P[-164 π / 180] == P1};
sol = NDSolve[system, {T, P}, {θ, -164 π / 180, 146 π / 180}];
Pnum[it, θ_] = P[θ] /. sol;
Tnum[it, θ_] = T[θ] /. sol;
}, {it, npts}], {it}] // Timing

```

Média e Variância

```

In[85]:= Pmedia[θ_] =  $\sum_{i=1}^{npts} Pnum[i, \theta] \Omega[[i]];$ 

```

```

In[86]:= Pvar[θ_] =  $\sum_{i=1}^{npts} (Pnum[i, \theta]^2 \Omega[[i]]) - Pmedia[\theta]^2;$ 

```

```

In[87]:= G = Plot[ $\frac{Pmedia[\theta \pi / 180]}{10^6}$ , {θ, -164, 146}, Axes → True, PlotRange → All]

```

```

In[88]:= TempoComputacional = (SessionTime[] - inicio) / 60

```

APÊNDICE D

D.1 Simulação sob incertezas do motor operando no ciclo Diesel por meio do MCE

Nessa se encontra o código computacional elaborado no software comercial Mathematica® versão 9.0.1.0, a fim de simular sob incertezas o funcionamento do motor diesel marítimo e com incertezas seguindo uma distribuição Uniforme. O presente programa foi empregado no Capítulo 6.

```
tinicio = SessionTime[];  
SetDirectory[NotebookDirectory[]];  
(*O DIRETÓRIO É O MESMO DO ARQUIVO DO MATHEMATICA*)
```

Dados de entrada (Condição operacional)

Início da combustão (radianos)

```
eic = N[-8 * π / 180];
```

Duração da combustão (radianos)

```
Δθ = N[(36.75) π / 180];
```

Temperatura na parede do cilindro (Kelvin)

```
Tp = 353.15
```

Pressão de ar de admissão (bar) obs: 1 bar = 10⁵Pa

```
P1 = 1.382 × 105;
```

Vazão mássica de ar (kg/h)

```
Var = 1001.662234;
```

Vazão mássica de combustível (kg/h)

```
Vcomb = 28.75;
```

Rotação (rad/s)

```
Rot = N[1200  $\frac{2\pi}{60}$ ];
```

Poder calorífico inferior - PCI (J/kg)

```
PCI = 42 700 000;
```

Razão Ar - Combustível real - A/C (adimensional)

```
AC = N[Var / Vcomb]
```

Razão entre calores específicos (adimensional)

```
k = (1.4 + 1.33) 0.5 (*k médio no intervalo [1.33 , 1.4]*)
```

Eficiência da combustão (adimensional)

```
ηc = 0.99;
```

Parâmetros do motor

Simulação sem combustão

Massa do gás no interior do cilindro

Massa de ar (kg)

$$m_{AR} = N \left[\frac{\frac{V_{ar}}{60}}{1200} \right]$$

Massa de combustível (kg)

$$m_{COMB} = N \left[\frac{\frac{V_{comb}}{60}}{1200} \right] \left(* \frac{kg}{h} \min = \frac{kg}{60 \min} \min = kg * \right)$$

Massa do gás (kg)

$$m_{GAS} = m_{COMB} + m_{AR}$$

Quantidade de energia total liberada no sistema (J)

$$Q_{Total} = N [\eta_c * m_{COMB} * PCI]$$

Equações relativas a geometria

$$S[\theta] = R \cos[\theta] + \sqrt{L^2 - R^2 \sin^2[\theta]};$$

$$V[\theta] = \frac{\pi d^2}{4} \left(L + R - S[\theta] + \frac{2R}{r-1} \right);$$

$$A[\theta] = \pi d \left(\frac{d}{2} + L + R - S[\theta] + \frac{2R}{r-1} \right);$$

Reação química aproximada por queima completa

Número de mols de cada espécie do combustível

$$nC = 13.762728233991359;$$

$$nH = 23.75141377462944;$$

$$nO = 0.047501781316799385;$$

Balanco da reação química

Elemento químico	H	C	O	N
Massa atômica	1,008	12,01	16	14,007

Massa atômica em g / mol



onde α é o número de moles de ar para a combustão completa

$$C : nC = a$$

$$H : nH = 2 b$$

$$O : nO + 2 \alpha = 2 a + b \rightarrow \alpha = \frac{2 a + b - nO}{2}$$

$$N : 2 \times 3.76 \alpha = 2 c$$

$$a1 = nC;$$

$$b1 = nH / 2;$$

$$\alpha = (2 a1 + b1 - nO) / 2;$$

$$c1 = 2 \times 3.76 \alpha / 2;$$

Número de mols de ar e combustível

$n_{AIR} = \alpha (2 + 3.76 \times 2)$ (*numero de mols de ar*)
 $n_{FUEL} = n_C + n_H + n_O$ (*numero de mols de combustivel*)
 Massa de ar para queima completa (massa de ar estequiometrica)
 $m_{ARest} = \alpha (2 \times 16 + 2 \times 3.76 \times 14.007)$
 Razão ar - combustivel estequiometrica
 $ACest = N [m_{ARest} / 190]$
 Determinando λ (excesso de ar)
 $\lambda = AC / ACest$

Temperatura inicial a partir da equação de estado

P = Pressão, V = Volume
 n = Mols de gás, R = Constante universal dos gases perfeitos
 T = Temperatura em Kelvin.
 Volume no fechamento da válvula de admissão
 $V1 = V [-146.5 \pi / 180]$
 Constante universal dos gases perfeitos
 $Rg = 8.314462$;
 $(\bar{R} = \frac{Rg}{m_{GAS}} [\frac{bar}{mol K}] [\frac{mol}{g}] = [\frac{bar}{K g}] *)$
 Número de mols do gás
 $nM = n_{FUEL} + n_{AIR}$
 Temperatura inicial
 $T1 = 45 + 274.15 (* \frac{P1 \cdot V1}{nM \cdot \frac{Rg}{1000}} *) (* \frac{P1 \cdot V1}{m_{GAS} \cdot 286.9} *)$
 $(* \frac{Pa}{kg} * \frac{m^3}{K kg} = K \frac{Pa m^3}{J} = K, \text{ mas } J = Pa m^3 *) (*420*)$

Transferência de calor para obter a condição inicial (Woschni)

Unidades da Equação de Woschni: P [kPa] ; d [m] ; T [K]
 Converter rad/s para m / s: m/s = raio * (rad/s) 1.5267
 $woschni [\theta] = 0.013 d^{-0.2} (P [\theta])^{0.8} T [\theta]^{-0.53} \left(2.28 * \frac{Sp}{2} * Rot \right)^{0.8}$;
 $fcor = 1.5267$;
 $Qp [\theta] = \frac{woschni [\theta] A [\theta]}{Rot} (T [\theta] - Tp) // FullSimplify;$

Solução numérica (curva de pressão sem combustão)

Equações principais

$$eq3 = \frac{1}{k-1} \left(\frac{1}{T[\theta]} T'[\theta] \right) = \frac{1}{P[\theta] V[\theta]} (-fcor Qp[\theta]) - \frac{1}{V[\theta]} V'[\theta];$$

$$eq4 = \frac{1}{k-1} (P[\theta] V'[\theta] + V[\theta] P'[\theta]) = (-fcor Qp[\theta]) - P[\theta] V'[\theta];$$

Solução do sistema de EDO para $-2.61799 < \theta < 2.79253$ [rad]

```
system = {eq3, eq4, T[-146.5 π / 180] == T1, P[-146.5 π / 180] == P1};  
sol = NDSolve[system, {T, P}, {θ, -146.5 π / 180, 126.5 π / 180}];
```

```
P0_num[θ_] = P[θ] /. sol;
```

```
T0_num[θ_] = T[θ] /. sol;
```

Dados experimental do MAN para 25 % de carga

```
experimento = ReadList["experimento25.dat", {Number, Number}];
```

```
H = ListPlot[experimento];
```

```
G = Plot[{{ $\frac{P0\_num[\theta \pi / 180]}{10^5}$ }}, {θ, -146.5, 126.5}, Axes → True, PlotRange → All];
```

```
Show[G, H, PlotRange → {{-140, 140}, {0, 110}}]
```

Simulação do motor

Pontos de Colocação e pesos correspondentes

```
level = 6;
```

```
strX = OpenRead@FileNameJoin@{"cc_d4_level" <> ToString /@ {level} <> "_x.txt";  
(*LER PONTOS DE COLOCAÇÃO A PARTIR DO ARQUIVO GERADO PELO FORTRAN*)
```

```
Ψ = ReadList[strX, {Number, Number, Number, Number}];
```

```
strW = OpenRead@FileNameJoin@{"cc_d4_level" <> ToString /@ {level} <> "_w.txt";  
(*LER PESOS A PARTIR DO ARQUIVO GERADO PELO FORTRAN*)
```

```
Ω = ReadList[strW, Number];
```

```
npts = Length[Ψ]
```

$$\text{SomaPesos} = \sum_{i=1}^{npts} \Omega[[i]]$$

$$\Omega = \frac{\Omega}{\text{SomaPesos}};$$

$$\sum_{i=1}^{npts} \Omega[[i]]$$

Discretização do domínio

```
numpoints = 620; (*quantidade de pontos*)
ef = 126.5; (*θ final*)
ei = -146.5; (*θ inicial*)
δθ = (ef - ei) / numpoints // N (*passo*);
θrad = Table[(θi + δθ i) π / 180, {i, 1, numpoints}];
θdeg = Table[θi + δθ i, {i, 1, numpoints}];
```

Função de Wiebe

Parâmetros ajustáveis

```
m = 1.8;
a = 6.9;
```

```
Wiebe[θ_] = 1 - Exp[-a ( (θ - θic) / Δθ )m+1];
```

```
x[θ_] = Piecewise[{{0, θ < θic}, {Wiebe[θ], θic ≤ θ}}, 1]; x'[θ] // Simplify;
```

```
ρ = {N[0.5 / a], N[0.5 / m], 0.02564102564102558, 1.25};
```

Transferência de calor (Woschni)

$$v_p = \frac{S_p}{2} \text{Rot}; \quad (*S_p \text{ [m]} \text{ e } \text{Rot} \text{ [rad/s]} *)$$

```
C2[θ_] = Piecewise[{{3.24 × 10-3, θ ≥ θic}, 0];
```

$$v_g[\theta] = 2.28 v_p + 0.00324 (P[\theta] - P_{0_{\text{num}}}[\theta] [1]) \text{Vd} \frac{T_1}{P_1 V_1};$$

```
woschni[θ_] = 0.013 d-0.2 (P[θ])0.8 T[θ]-0.53 v_g[θ]0.8;
```

```
fcor = 1.5267;
```

$$Q_p[\theta] = \frac{\text{woschni}[\theta] A[\theta]}{\text{Rot}} (T[\theta] - T_p) // \text{FullSimplify};$$

Obs : $P_{0_{\text{num}}}$ é a curva de pressão sem combustão

Solução numérica

```

eq5 =  $\frac{1}{k-1} \left( \frac{T'[\theta]}{T[\theta]} \right) == \frac{1}{P[\theta] V[\theta]} (Q_{\text{Total}} x'[\theta] - f_{\text{cor}} Q_p[\theta]) - \frac{1}{V[\theta]} V'[\theta];$ 
eq6 =  $\frac{1}{k-1} (P[\theta] V'[\theta] + V[\theta] P'[\theta]) == (Q_{\text{Total}} x'[\theta] - f_{\text{cor}} Q_p[\theta]) - P[\theta] V'[\theta];$ 
system = {eq5, eq6, T[-146.5 π / 180] == T1, P[-146.5 π / 180] == P1};
sol = NDSolve[system, {T, P}, {θ, -146.5 π / 180, 126.5 π / 180}];
Pnum[θ_] = P[θ] /. sol;
Tnum[θ_] = T[θ] /. sol;
W = Plot[ $\left\{ \frac{P_{\text{num}}[\theta \pi / 180]}{10^5}, \frac{P_{0_{\text{num}}}[\theta \pi / 180]}{10^5} \right\}$ , {θ, -146.5, 126.5},
  Axes → True, PlotRange → All, PlotStyle → {Black, Green}];
Show[W, H, PlotRange → {{-140, 140}, {0, 110}}]

Monitor[
  Do[ $\{ \kappa_1 = \Psi[[it]][[1]]; \kappa_2 = \Psi[[it]][[2]]; \kappa_3 = \Psi[[it]][[3]]; \kappa_4 = \Psi[[it]][[4]];$ 
    (*equações principais*) (*κ → ponto de colocação ;
    ρ → grau de incerteza *)
    x[θ_] = Piecewise[ $\left\{ \{0, \theta < \theta_{ic}\}, \left\{ 1 - \text{Exp}\left[-a (1 + \kappa_1 \rho[[1]]) \left( \frac{\theta - \theta_{ic}}{\Delta\theta} \right)^{m (1 + \kappa_2 \rho[[2]) + 1}\right], \theta_{ic} \leq \theta \right\}, 1 \right\}$ ];
    eq5 =  $\frac{1}{k (1 + \kappa_3 \rho[[3]]) - 1} \left( \frac{T'[\theta]}{T[\theta]} \right) ==$ 
       $\frac{1}{P[\theta] V[\theta]} (Q_{\text{Total}} x'[\theta] - f_{\text{cor}} Q_p[\theta] (1 + \kappa_4 \rho[[4]])) - \frac{1}{V[\theta]} V'[\theta];$ 
    eq6 =  $\frac{1}{k (1 + \kappa_3 \rho[[3]]) - 1} (P[\theta] V'[\theta] + V[\theta] P'[\theta]) ==$ 
       $(Q_{\text{Total}} x'[\theta] - f_{\text{cor}} Q_p[\theta] (1 + \kappa_4 \rho[[4]]) - P[\theta] V'[\theta]);$ 
    system = {eq5, eq6, T[-146.5 π / 180] == T1, P[-146.5 π / 180] == P1};
    sol = NDSolve[system, {T, P}, {θ, -146.5 π / 180, 126.5 π / 180}];
    Pnum[it, θ_] = P[θ] /. sol;
    Tnum[it, θ_] = T[θ] /. sol;
    Clear[P, T]
  }, {it, npts}], {it}] // Timing

```

Média e Variância

$$P_{\text{media}}[\theta] = \sum_{i=1}^{npts} P_{\text{num}}[i, \theta] \Omega[[i]];$$

$$P_{\text{var}}[\theta] = \sum_{i=1}^{npts} (P_{\text{num}}[i, \theta]^2 \Omega[[i]]) - P_{\text{media}}[\theta]^2;$$

Gráfico

```

W = Plot[ $\left\{ \frac{P_{\text{media}}[\theta \pi / 180]}{10^5}, \frac{P_{0_{\text{num}}}[\theta \pi / 180]}{10^5} \right\}$ , {θ, -146.5, 126.5},
  Axes → True, PlotRange → All, PlotStyle → {Black, Green}];
Show[W, H, PlotRange → {{-140, 140}, {0, 80}}]

```