

## ESTUDO DA COMBUSTÃO DO BIODIESEL

Lucas Norberto Rufo Vetorazzi, Fábio Bongoski, Roberto Wolf Francisco Jr.

### INTRODUÇÃO

Os combustíveis fósseis representam 95% da energia utilizada no transporte mundial, no entanto, alternativas ao uso destes combustíveis vêm sendo estudadas devido ao surgimento de novas regulamentações com relação às emissões de poluentes. Desse modo, a mistura de etanol à gasolina já é uma prática comum em diversos países. No Brasil a gasolina comercial pode ter adição de até 30% de etanol, como estabelecido pela Resolução n° 9/2025 do CNPE.

Este trabalho tem como objetivo analisar, por meio de simulações numéricas, os efeitos da adição de etanol ao diesel. Considerando a complexidade do diesel comercial, composto por centenas de espécies químicas que dificultam a modelagem da combustão, o estudo foca na determinação da velocidade de chama laminar adiabática e da energia de ativação global aparente para o diesel puro e para uma mistura contendo 80% diesel e 20% etanol, a fim de entender como o etanol influencia as características de combustão do diesel.

### DESENVOLVIMENTO

Foram selecionados 4 mecanismos de cinética química. O primeiro (mecanismo A) é a versão reduzida do mecanismo desenvolvido pelo Laboratório Nacional *Lawrence Livermore*, que modela o diesel como uma mistura de 77% de n-dodecano e 23% de m-xileno, e possui um total 163 espécies químicas e 887 reações intermediárias (PEI et al., 2015). O segundo (mecanismo B), proposto por Hockett (2016), modela o diesel como n-heptano e possui um total de 141 espécies e 709 reações. O terceiro (mecanismo C), desenvolvido pelo CRECK *modeling group*, possui 368 espécies químicas e 14462 reações. A versão CRECK – HT possui apenas coeficientes para reações a temperaturas elevadas, e modela o diesel como I-C<sub>16</sub>H<sub>34</sub>. O último (mecanismo D) é semelhante ao anterior, porém possui também os coeficientes para as reações a baixas temperaturas, utiliza N-C<sub>16</sub>H<sub>34</sub> para substituir o diesel e possui 492 espécies e 17790 reações (RANZI et al., 2014). Apenas os dois mecanismos desenvolvidos pelo grupo CRECK foram utilizados para simular a mistura de 80% diesel e 20% etanol.

O estudo numérico foi feito utilizando o modelo de chama laminar unidimensional do pacote Cantera, de Goodwin et al. (2023). A simulação foi feita com pressão atmosférica, temperatura dos reagentes variando entre 298 e 453 K, razão de equivalência ( $\phi$ ) entre 0,8 e 1,2 e os critérios de malha foram: *ratio* 3,0, *slope* 0,1 e *curve* 0,1. Os resultados da simulação foram a velocidade de chama laminar adiabática ( $S_L$ ) e as temperaturas de chama adiabática ( $T_{ad}$ ) para cada condição, que foram então utilizados para calcular a energia de ativação global ( $E_a$ ) como proposto por Egolfopoulos e Law (1990).

### RESULTADOS

Como visto na Figura 1, para diesel 100% os mecanismos B e C obtiveram resultados semelhantes em toda a faixa de temperatura, com uma diferença relativa máxima de 5,1%, em

$\phi = 0,8$  e 453 K. O mecanismo D obteve resultados entre 15,7% e 17,2% mais altos que os do mecanismo C. O mecanismo A apresentou um comportamento diferente do esperado pois houve redução da velocidade de chama em razões de equivalência superiores a 1,0, valor este que deveria ser máximo em  $\phi = 1,1$ , como relatado por Chong e Hochgreb (2010), Francisco e Oliveira (2018), Konnov et al. (2018) e Dirrenberger et al. (2014) para diversos combustíveis.

Para o mecanismo C as velocidades de chama da mistura diesel-etanol foram em média 0,98 cm/s maiores do que as do diesel puro, para o mecanismo D foram 0,82 cm/s maiores. Isto também foi registrado por Bongoski (2024), que reportou experimentalmente que a adição de etanol à gasolina aumentou a velocidade de chama de 1 cm/s a 3 cm/s. No entanto, o aumento da temperatura causa efeito oposto sobre os mecanismos C e D, como notado na Figura 2. À 453 K a diferença entre os combustíveis é máxima para o mecanismo C, sendo a velocidade de chama da mistura em média 1,30 cm/s mais alta que a do diesel puro. Para o mecanismo D, nesta mesma temperatura, a diferença é mínima entre os combustíveis, em média 0,25 cm/s.

Na razão estequiométrica, a energia de ativação global aparente do diesel calculada a partir do mecanismo C foi de 337,2 kJ/mol, enquanto pelo mecanismo D foi de 339,5 kJ/mol. Para a mistura diesel-etanol, os valores obtidos a partir dos mecanismos C e D foram 329,7 kJ/mol - 2,2% menor - e 317,6 kJ/mol - 6,5% - menor, respectivamente. A redução da energia de ativação também foi notada experimentalmente por Bongoski (2024).

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

A adição do etanol ao diesel resultou em um aumento da velocidade de chama laminar adiabática do combustível e redução da energia de ativação com relação ao diesel puro, resultados que condizem com a literatura encontrada para outros combustíveis. No entanto, o aumento da temperatura resultou em aumento na diferença entre as velocidades de chama de ambos os combustíveis para o mecanismo C, enquanto para o mecanismo D a diferença entre os combustíveis diminuiu.

A quantidade de reações e espécies químicas de um mecanismo de cinética química não é um indicativo direto da precisão dos resultados destes. No entanto, deve ser considerada a finalidade com a qual os mecanismos foram desenvolvidos. Além disso, há maior similaridade entre os mecanismos e com a literatura em temperaturas de reagentes mais baixas e na razão de equivalência estequiométrica.

**Palavras-chave:** combustão; velocidade de chama; energia de ativação; diesel; etanol; simulação numérica; cinética química.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BONGOSKI, F. (2024). Análise de uma mistura substituta da gasolina com diferentes concentrações de etanol utilizando um queimador de chama plana. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Universidade do Estado de Santa Catarina, 2024

- BRASIL. Conselho Nacional de Políticas Energéticas (CNPE). Resolução nº 9, de 25 de junho de 2025. Dispõe sobre a mistura obrigatória do etanol anidro à gasolina comercializada em todo o território nacional. **Diário Oficial da União:** seção 1, Brasília, DF, n. 122, p. 11, 2 jul. 2025.
- CHONG, C. T., & HOCHGREB, S. (2011). Measurements of laminar flame speeds of liquid fuels: Jet-A1, diesel, palm methyl esters and blends using particle imaging velocimetry (PIV). **Proceedings of the Combustion Institute**, 33(1), 979–986.
- DIRRENBERGER, P.; GLAUDE, P. A.; BOUNACEUR, R.; LE GALL, H.; DA CRUZ, A. P.; KONNOV, A. A.; BATTIN-LECLERC, F. Laminar burning velocity of gasolines with addition of ethanol. **Fuel**, v. 115, p. 162–169, 2014.
- GOODWIN G., D. et al. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. 2023.
- EGOLFOPOULOS, F. N., & Law, C. K. (1990). Chain Mechanisms in the Overall Reaction Orders in Laminar Flame Propagation. In **COMBUSTION AND FLAME** (Vol. 80).
- FRANCISCO, R. W., & OLIVEIRA, A. A. M. (2018). Simultaneous measurement of the adiabatic flame velocity and overall activation energy using a flat flame burner and a flame asymptotic model. **Experimental Thermal and Fluid Science**, 90, 174–185.
- HOCKETT, A., HAMPSON, G., & MARCHESE, A. J. (2016). Development and Validation of a Reduced Chemical Kinetic Mechanism for Computational Fluid Dynamics Simulations of Natural Gas/Diesel Dual-Fuel Engines. **Energy & Fuels**, 30(3), 2414–2427.
- KONNOV, A. A., MOHAMMAD, A., KISHORE, V. R., KIM, N. il, PRATHAP, C., & KUMAR, S. (2018). A comprehensive review of measurements and data analysis of laminar burning velocities for various fuel+air mixtures. In **Progress in Energy and Combustion Science** (Vol. 68, pp. 197–267). Elsevier Ltd.
- PEI, Y., MEHL, M., LIU, W., LU, T., PITZ, W. J., & SOM, S. (2015). A multicomponent blend as a diesel fuel surrogate for compression ignition engine applications. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, 137(11).

---

#### DADOS CADASTRAIS

---

**BOLSISTA:** Lucas Norberto Rufo Vетораззи

**MODALIDADE DE BOLSA:** PROBIC/UDESC (IC)

**VIGÊNCIA:** 01/09/2024 a 31/08/2025 – Total: 12 meses

**ORIENTADOR(A):** Roberto Wolf Francisco Junior

**CENTRO DE ENSINO:** CCT

**DEPARTAMENTO:** Departamento De Engenharia Mecânica CCT

**ÁREAS DE CONHECIMENTO:** Engenharias / Engenharia Mecânica / Engenharia Térmica

**TÍTULO DO PROJETO DE PESQUISA:** Estudo da Velocidade de Chama Laminar e da Energia de Ativação Global Aparente de Combustíveis Líquidos e Gasosos Parte 2

**Nº PROTOCOLO DO PROJETO DE PESQUISA:** NPP2964-2022