CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS

Diretoria de Pesquisa e Pós-Graduação

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

DISSERTAÇÃO

FELIPE AUGUSTO DE SOUZA PEREIRA

DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE NO BASEADO EM PARÂMETROS DA LIBERAÇÃO DE CALOR DE UM MOTOR DE IGNIÇÃO POR CENTELHA

Belo Horizonte
2025

FELIPE AUGUSTO DE SOUZA PEREIRA

Determinação da Concentração de NO Baseado em Parâmetros da Liberação de Calor de Um Motor de Ignição Por Centelha

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Thiago Augusto Araujo Moreira

Coorientador: Prof. Dr. Fernando Antônio Rodrigues Filho

Linha de Pesquisa: Eficiência Energética

Belo Horizonte
2025

Pereira, Felipe Augusto de Souza
P436d Determinação da concentração de NO baseado em parâmetros da liberação de calor de um motor de ignição por centelha / Felipe Augusto de Souza Pereira. – 2025.
109 f. : il., gráfs, tabs.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.
Orientador: Thiago Augusto Araujo Moreira.
Coorientador: Fernando Antônio Rodrigues Filho.
Banca examinadora: Thiago Augusto Araújo Moreira, Fernando Antônio Rodrigues Filho, Artur Caron Mottin e Leonardo Santos Lima.
Bibliografia: f. 90-94.
Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

1. Motores de combustão interna – Teses. 2. Algoritmos – Teses. 3. Análise numérica – Teses. 4. Combustão – Modelos – Teses. 5. Óxidos de nitrogênio – Concentração – Teses. I. Moreira, Thiago Augusto Araújo. II. Rodrigues Filho, Fernando Antônio. III. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. IV. Título.

CDD 621.43

Elaboração da ficha catalográfica pela bibliotecária Jane Marangon Duarte, CRB 6ª 1592 / Cefet/MG

Felipe Augusto de Souza Pereira

“Caracterização da formação de NOx baseado em parâmetros da liberação de calor de um motor de ignição por centelha”

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Linha de Pesquisa: Eficiência Energética

Belo Horizonte, 12 / 09 / 2025

Resultado: **APROVADO**

Banca Examinadora:

Documento assinado digitalmente
gov.br
THIAGO AUGUSTO ARAUJO MOREIRA
Data: 11/11/2025 18:28:54-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Prof. Dr. Thiago Augusto Araújo Moreira
PPGEM / CEFET-MG

Documento assinado digitalmente
gov.br
FERNANDO ANTONIO RODRIGUES FILHO
Data: 11/11/2025 18:19:54-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Prof. Dr. Fernando Antônio Rodrigues Filho
PPGEM / CEFET-MG

Documento assinado digitalmente
gov.br
ARTUR CARON MOTTIN
Data: 16/09/2025 10:08:58-0300

Prof. Dr. Artur Caron Mottin
PPGEM / CEFET-MG

Documento assinado digitalmente
gov.br
LEONARDO DOS SANTOS LIMA
Data: 16/09/2025 10:42:13-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Prof. Dr. Leonardo Dos Santos Lima
CEFET-MG

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, a Deus por me manter firme até aqui e pela permissão de concluir com êxito este trabalho, sustentando-me nos momentos mais difíceis.

Agradeço à minha companheira, Rayssa Caldeira, por ser uma presença constante e compreensiva em minha vida, pelo apoio incondicional e pelas contribuições essenciais que tornaram possível a realização deste trabalho. Seu incentivo, carinho e suporte técnico no aprofundamento da cinética química, ponto-chave desta pesquisa, foram fundamentais para que eu pudesse seguir com perseverança e alcançar este êxito. Sua motivação e fé foram um alicerce firme em cada etapa desta jornada.

À minha querida mãe, Rosângela Margaret, que me apoiou de forma incondicional e me ensinou virtudes que me tornaram o homem que sou hoje, agradeço por todo o sacrifício e dedicação que fez e continua fazendo para me possibilitar chegar até aqui. À minha querida irmã, Kênia Margaret, por sempre me apoiar, oferecer suporte nos momentos de dificuldade e vibrar com sinceridade a cada etapa vencida nesta longa trajetória, e a toda a minha amada família, por sempre acreditar e apoiar.

Um agradecimento especial ao amigo e incentivador Paulo Penha, que me deu tanto suporte ao longo do processo, compartilhando ensinamentos e experiências fundamentais para alcançar os resultados deste trabalho. Dedico-lhe meu reconhecimento pelo tempo, atenção e paciência singular com que me auxiliou em cada etapa.

Ao professor Thiago Moreira, orientador deste trabalho, por todo o suporte prestado, pelos ensinamentos, conselhos e apoio durante toda a jornada, bem como pela compreensão e sensibilidade diante das dificuldades encontradas.

Aos colegas e professores do PPGEM, pelos aprendizados e pela oportunidade de crescimento proporcionados ao longo desta jornada.

A todos, expresso os meus mais sinceros agradecimentos.

"Confie ao Senhor tudo o que você faz, e seus planos serão bem-sucedidos." (Provérbios 16:3)

“Portanto, humilhem-se sob o grande poder de Deus e, no tempo certo, ele os exaltará.” (1 Pedro 5:6)

RESUMO

Os motores de combustão interna desempenham um papel essencial na mobilidade urbana global. No Brasil cerca de 93% dos veículos leves utilizam somente motores a combustão interna como fonte propulsora. No entanto, o processo de combustão dos combustíveis fósseis gera diversos poluentes, como: monóxido de carbono (CO), óxidos de nitrogênio (NO_X), hidrocarbonetos (HC) e material particulado, além do dióxido de carbono (CO_2) que é um gás intensificador do efeito estufa. Esses gases são prejudiciais à saúde humana e ao meio ambiente, contribuindo para a redução da qualidade do ar e, consequentemente, para o a ocorrência de problemas respiratórios e doenças como o câncer, além de agravarem as mudanças climáticas que vêm ocorrendo no planeta Terra. Regulamentações ambientais mais rigorosas têm sido adotadas em diversos países, como a norma EURO 7, que será aplicada na Europa a partir do ano de 2026. No Brasil, está em vigor a PROCONVE L8. Tais regulamentações são implementadas para controlar as emissões de poluentes e impulsionar o desenvolvimento de motores mais eficientes e sustentáveis. Para atender essas regulamentações, montadoras e fabricantes de veículos utilizam diversas ferramentas computacionais aplicadas ao estudo do comportamento dos motores, incluindo modelos de combustão. Esses modelos permitem, por exemplo, simular o comportamento dos gases e prever a formação de poluentes sem a necessidade de testes experimentais extensivos. Neste estudo, desenvolveu-se um algoritmo numérico capaz de determinar a pressão, temperatura dos gases contidos no interior do cilindro, e a concentração de NO emitido para motores a combustão interna com ignição por centelha. Como embasamento teórico para desenvolvimento do algoritmo utilizou-se teorias como a função de Wiebe, capaz de determinar a taxa de liberação de calor do motor, modelos de combustão para a obtenção da pressão e temperatura dos gases no interior do cilindro e o mecanismo térmico de Zeldovich para estimar a concentração de NO gerado durante o processo. Os testes foram realizados em um motor 1.3L PFI, abastecido com etanol hidratado (E100), utilizou um dinamômetro de bancada equipado com um analisador de gás que utiliza o princípio de luminescência química para realização dos ensaios. Por meio do uso desse equipamento foi possível medir as concentrações de NO emitidas pelo motor. Os resultados obtidos demonstraram que o algoritmo apresentou correlação com os dados experimentais, alcançando um coeficiente de correlação de r=0,9630 com erro médio de aproximadamente 8% para as concentrações de NO.

Palavras-chave: Algoritmo Numérico; Mecanismo de Zeldovich; Modelo de Combustão; Motores a combustão interna; Óxidos de Nitrogênio.

ABSTRACT

Internal combustion engines play an essential role in global urban mobility. In Brazil, approximately 93% of light vehicles use internal combustion engines as their primary source of propulsion. However, the combustion process of fossil fuels generates various pollutants, such as carbon monoxide (CO), nitrogen oxides (NO_X), hydrocarbons (HC), and particulate matter, in addition to carbon dioxide (CO_2), which is a greenhouse gas. These gases are harmful to human health and the environment, contributing to reduced air quality and, consequently, to the occurrence of respiratory problems and diseases such as cancer, as well as exacerbating climate change occurring on planet Earth. More stringent environmental regulations have been adopted in several countries, such as the EURO 7 standard, which will be applied in Europe from 2026. In Brazil, PROCONVE L8 is in force. These regulations are implemented to control pollutant emissions and drive the development of more efficient and sustainable engines. To meet these regulations, automakers and vehicle manufacturers use various computational tools applied to the study of engine behavior, including combustion models. These models allow, for example, simulating the behavior of gases and predicting the formation of pollutants without the need for extensive experimental testing. In this study, a numerical algorithm was developed capable of determining the pressure, temperature of the gases contained inside the cylinder, and the concentration of NO emitted by spark-ignition internal combustion engines. As a theoretical basis for the development of the algorithm, theories such as the Wiebe function, capable of determining the heat release rate of the engine, combustion models for obtaining the pressure and temperature of the gases inside the cylinder, and the Zeldovich thermal mechanism were used to estimate the concentration of NO generated during the process. The tests were performed on a 1.3L PFI engine, fueled with hydrated ethanol (E100), using a bench dynamometer equipped with a gas analyzer that utilizes the principle of chemiluminescence for the tests. Using this equipment, it was possible to measure the concentrations of NO emitted by the engine. The results obtained demonstrated that the algorithm correlated with the experimental data, achieving a correlation coefficient of r=0.9630 with an average error of approximately 8% for the NO concentrations.

Keywords: Internal combustion engines; Numerical algorithm; Nitrogen oxides; Combustion model.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Evolução das emissões de poluentes no estado de São Paulo no período de 2006 a 2021 ..... **19**

Figura 2 – Limite de massa emitida de poluente por quilometro percorrido para veículos leves em cada etapa da legislação PROCONVE, adotada de 1988 a 2025..... **20**

Figura 3 – Projeção de consumo final das principais fontes de energia do Brasil para 2034..... **23**

Figura 4 – Ciclo de operação para motores de 4 tempos..... **26**

Figura 5 – Representação do ciclo Otto ideal: (a) diagrama pressão-volume (P–v); (b) diagrama temperatura-entropia (T–s)..... **28**

Figura 6 – Comparativo do ciclo Otto teórico (ideal) e ciclo Otto Real..... **29**

Figura 7 – Características geométricas do motor..... **30**

Figura 8 – Veículos leves e comerciais leves emplacados por ano para cada tipo de combustível..... **32**

Figura 9 - Esquema do volume de controle definido para a Câmera de combustão para o modelo zero-dimensional..... **38**

Figura 10 – Esquema do volume de controle definido para a câmera de combustão para o modelo quasi-dimensional considerando as duas zonas..... **39**

Figura 11 – Comportamento da função de Wiebe devido a variação do parâmetro de forma "ω"..... **41**

Figura 12 – Processo de formação dos poluentes durante o ciclo do motor..... **47**

Figura 13 – Relação da quantidade de poluentes emitidos com a relação ar/ combustível do motor..... **48**

Figura 14 – Calor específico a pressão constante em função da temperatura para diversas substâncias..... **61**

Figura 15 – Calor especifico a volume constante em função da temperatura para as zonas de combustão..... **61**

Figura 16 – Fração de massa queimada para as condições analisadas do Motor 1. (a): Condição de 4500RPM e 3 bar de PME; (b): Condição de 4500RPM e 6 bar de PME; (c): Condição de 4500RPM e 9 bar de PME; (d): Condição de 3500RPM e 3 bar de PME; (e): Condição de 3500RPM e 6 bar de PME; (f): Condição de 3500RPM e 9 bar de PME; (g): Condição de 2500RPM e 3 bar de PME; (h): Condição de 2500RPM e 6 bar de PME; (i): Condição de 2500RPM e 9 bar de PME..... **70**

Figura 17 – Fração de massa queimada para o Motor 2. (a) Condição de operação de 4500 rpm com 20% de torque; (b) Condição de operação de 4500 rpm com 50% de torque.....**76**

Figura 18 – Erro associado a cada fração de massa queimada determinado com o modelo matemático proposto para o Motor 2.....**77**

Figura 19 – Pressão dos gases no interior do cilindro – Motor 1. (a) Condição de operação de 4500 rpm, (b) Condição de operação de 3500 rpm, (c) Condição de operação de 2500 rpm.....**79-80**

Figura 20 – Pressão dos gases no interior do cilindro – Motor 2. (a) Condição de operação de 4500 rpm com 20% de torque; (b) Condição de operação de 4500 rpm com 50% de torque.....**81**

Figura 21 – Gradiente de temperatura para o Motor 2. (a) Condição de operação de 4500 rpm com 20% de torque; (b) Condição de operação de 4500 rpm com 50% de torque..... **82**

Figura 22 – Formação de NO x ângulo do virabrequim – Motor 1. (a) Condição de operação de 4500 rpm, (b) Condição de operação de 3500 rpm, (c) Condição de operação de 2500 rpm.....**84-85**

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Principais propriedades químicas do etanol e da gasolina. **21**

Tabela 2 - Parâmetro de eficiência da função de Wiebe para diferentes eficiências de conversão do combustível em energia. **40**

Tabela 3 – Comportamento da reação baseado na variação da energia livre de Gibbs. **55**

Tabela 4 – Dados dos motores conforme dados dos fabricantes. **57**

Tabela 5 – Concentrações mássicas das espécies químicas. **58**

Tabela 6 – Propriedades das espécies químicas. **59**

Tabela 7 – Coeficiente de ajuste de transferência de calor estimados para cada condição de operação. **63**

Tabela 8 – coeficientes de ajuste de perda térmica para as zonas da Câmara de Combustão estimados para cada condição de operação. **65**

Tabela 9– Parâmetros de forma estimados para cada condição de operação do motor de cada motor. **68**

Tabela 10 – Erro associado a cada fração de massa queimada determinado com o modelo matemático proposto para o Motor 1. **72**

Tabela 11 – Duração de queima obtida através do modelo matemático proposto para cada condição de operação para o Motor 1. **72**

Tabela 12 – Duração de queima experimental para cada condição de operação do Motor 1. **73**

Tabela 13 – Diferença percentual entre a duração de queima de combustível calculado através do modelo e dos dados medidos experimentalmente para o Motor 1 **73**

Tabela 14 – Duração de queima obtida através do modelo matemático para cada condição de operação para o Motor 2. **76**

Tabela 15 – Duração de queima experimental para cada condição de operação do Motor 2. **76**

Tabela 16 – Diferença percentual entre a duração de queima de combustível do modelo e dos dados experimentais para o Motor 2. **77**

Tabela 17 – Pressão máxima dos gases no interior do cilindro para o Motor 1. **77**

Tabela 18 – Pressão máxima dos gases no interior do cilindro para o Motor 2. **78**

Tabela 19 – Concentração de óxido nítrico emitido – Motor 1. **82**

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
AFR	*Air fuel ratio* – Razão air-combustível
ANFAVEA	Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores
ANP	Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
CETESB	Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
CH_4	Metano
CO	Monóxido de carbono
CO_2	Dióxido de carbono
CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
COP21	21ª Conferência das Partes da Convenção - Quadro das Nações Unidas sobre Mudança do Clima
CTM	Centro do Tecnologia da Mobilidade
E100	Etanol etílico hidratado
E25	Gasolina comum tipo C com 25% de Etanol na composição
EAC	Etanol Anidro Combustível
EHC	Etanol Hidratado Combustível
EPA	*Environmental Protection Agency* – Agência de proteção ambiental
EUA	Estados Unidos da América
est	Estequiométrico
FTP-75	*Federal Test Procedure* – Procedimento de teste federal
gas	Gasolina
HC	Hidrocarboneto
H_2O	Água
i	Instantâneo

IBAMA	Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis
ign	Ignição
MON	Motor Octane Number – Número de octanagem do motor
MP	Material particulado
NMHC	Non-methane Hydrocarbons – Hidrocarbonetos não metanos
NMOG	non-methane organic gas – Gás orgânicos não metanos
N	Nitrogênio
N_2	Nitrogênio molecular
ppm	Partícula por milhão
NO	Óxido de nítrico ou monóxido de nitrogênio
NO_2	Dióxido de nitrogênio
NO_x	Óxidos de nitrogênio
O	Oxigênio
O_2	Oxigênio molecular
O_3	Ozônio
PCI	Poder calorifico inferior
PFI	*Port Fuel Injection* – Injeção indireta de combustível
PME	Pressão média efetiva
PMI	Ponto morto inferior
PMS	Ponto morto superior
PROCONVE	Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores
RO_2	Peroxila
RON	Research Octane Number – Número de octanagem de pesquisa
RPM	Rotação por minuto
RCHO	Aldeídos
SMOG	Nevoa de oxidantes fotoquímicos
SO_2	Dióxido de enxofre

SOC	*Start of Combustion* – Início da combustão
UFMG	Universidade Federal de Minas Gerais
VOC	Compostos orgânicos voláteis

LISTA DE SÍMBOLOS

0D	Modelo zero dimensional
A	Fator Pré-exponencial
A_c	Area superficial do cilindro
a	Excêntrico do eixo virabrequim
B	Diâmetro do cilindro
b	*Burned* – Queimado
C_V	Calor Específico a Volume Constante
C_P	Calor Específico a Pressão Constante
E_a	Energia de Ativação
EGR	Exhaust Gas Recirculation – Sistema de recirculação de gases da exaustão
l	Comprimento da biela
m	Massa
r_c	Razão volumétrica de compressão
P_{MAX}	Pressão máxima dos Gases no interior do cilindro
X_b	Fração de Massa Queimada
$\dot{\eta}_{conv}$	Eficiência De Conversão Do Combustível
REF	Coeficientes de Referência
k_{1f}	Constantes Cinéticas de Avanço das Reações
k_{2f}	Constantes Cinéticas de Avanço das Reações
K_p	Constante de equilíbrio da reação de dissociação do oxigênio molecular

MBF	*Mass Burned Fraction* – Fração Mássica queimada
mm	Massa Molar
mb	Média burned
mub	Média unburned
R	Constante dos gases
S(θ)	Posição instantânea do motor
u	*Unburned* – Não queimado
V(θ)	Volume instantâneo deslocado em função do ângulo do virabrequim
V_c	Volume da câmara de combustão
V_d	Volume deslocado
V_m	Volume mássico da substância (%)
ΔG_T^o	Variação da Energia Livre de Gibbs Padrão
Ɵ	Posição Angular do Virabrequim
λ	Fator Lambda
γ	Coeficiente politrópico
ξ	Coeficiente de Ajuste
ω	Parâmetro de forma da função de Wiebe
α	Parâmetro de eficiência da função de Wiebe

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 19
1.1 JUSTIFICATIVA 22
2 OBJETIVOS 25
2.1 OBJETIVO GERAL 25
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS 25
3 REVISÃO BIBLIOGRAFICA 26
3.1 MOTORES DE 4 TEMPOS 27
3.3 CARACTERISTICA GEOMETRICA DO MOTOR 30
3.4 COMBUSTÍVEIS 32
3.4.1 GASOLINA 33
3.4.2 ETANOL 34
3.4.3 ESTEQUIOMETRIA 34
3.4.3.1 GASOLINA TIPO A 35
3.4.5 RELAÇÃO AR/COMBUSTÍVEL 36
3.5 MODELOS DE COMBUSTÃO 37
3.5.1 MODELO ZERO-DIMENSIONAL OU TERMODINÂMICO 38
3.5.2 MODELO QUASE-DIMENSIONAL 40
3.6 FUNÇÃO DE WIEBE DE ESTÁGIO ÚNICO 41
3.6.1 DETERMINAÇÃO DO PARÂMETRO DE FORMA 44
3.7 COEFICIENTE POLITRÓPICO 45
3.8 POLUIÇÃO ATMOSFERICA 46
3.8.1 ÓXIDOS DE NITROGÊNIO 49
4 METODOLOGIA 59
4.1 DADOS EXPERIMENTAIS 59
4.2 DADOS GERAIS DOS MOTORES 60
4.3 PROPRIEDADES DOS GASES 60
4.4 TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR 64
4.5 GRADIENTE DE TEMPERATURA 67
4.6 CONCENTRAÇÃO DE ÓXIDO NÍTRICO (NO) 69
4.7 INCERTEZA DE MEDIÇÃO 69
5 RESULTADOS 70

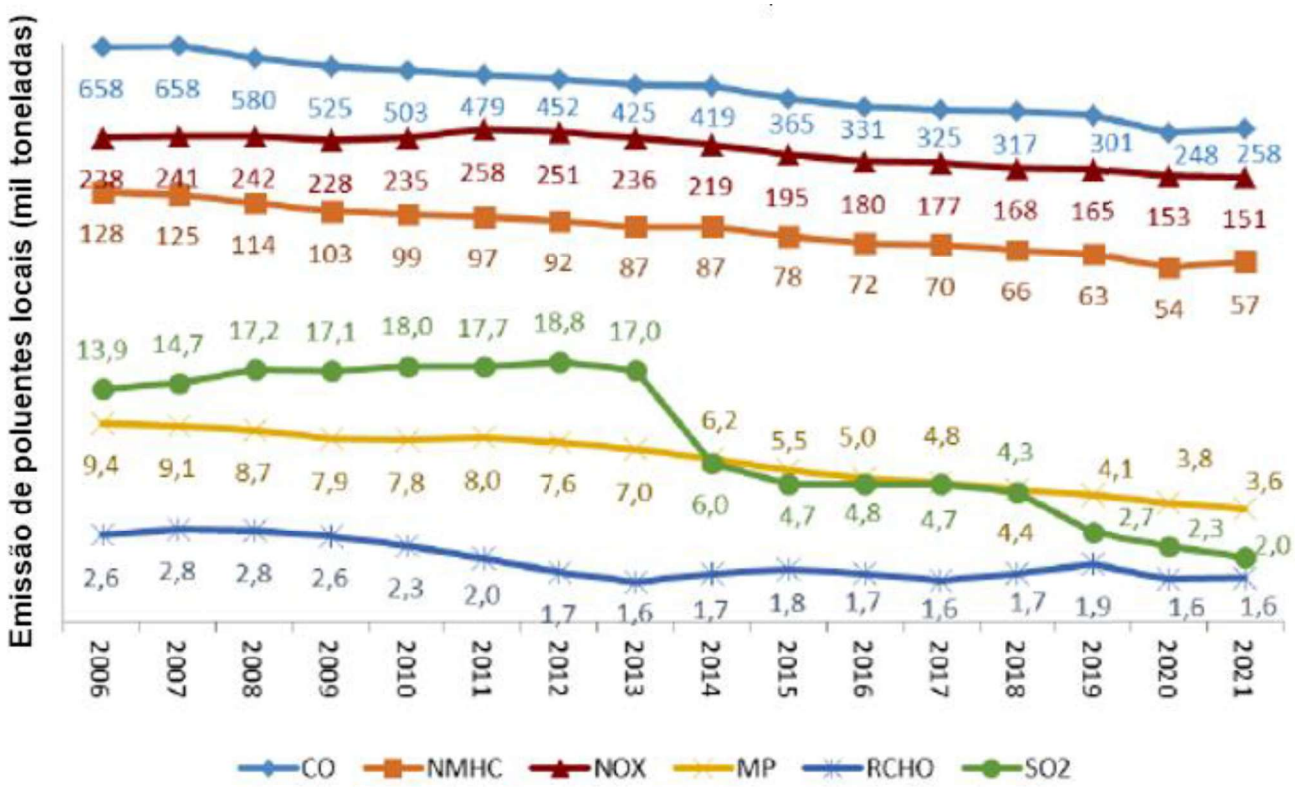
5.1 CÁLCULO DA FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA 70
5.2 CÁLCULO PRESSÃO DOS GASES 80
5.3 DETERMINAÇÃO DO GRADIENTE DE TEMPERATURA 84
5.4 DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE ÓXIDO NÍTRICO (NO) 85
6 CONCLUSÃO 88
6.1 TRABALHOS FUTUROS 90
REFERÊNCIAS 91
APÊNDICE A – CODIGO EM SCILAB 96

1 INTRODUÇÃO

Os veículos automotores revolucionaram a mobilidade urbana, gerando diversos benefícios para o cotidiano dos seres humanos. Possibilitaram o deslocamento mais eficaz, o ágil transporte de suprimentos e pessoas, gerando benefícios ao comércio e conforto aos usuários A principal forma de geração da energia mecânica que movimenta as rodas foram os motores a combustão interna, responsáveis por converter a energia química proveniente da queima do combustível em energia mecânica. Este tipo de motor começou a ser produzido em escala no final do século XIX, sendo um marco tecnológico para a época. Segundo Heywood (2019), cerca de 50.000 motores desse tipo foram produzidos na Europa e EUA até o ano de 1890.

Os motores a combustão são movidos, na sua grande maioria, por combustíveis fósseis. Conforme dados publicados pela ANFAVEA (Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores), em 2024, cerca de 93% dos veículos leves e comerciais leves comercializados no Brasil eram equipados com motores a combustão sem nenhum nível de eletrificação. Esses veículos são abastecidos principalmente com gasolina tipo C ou diesel, combustíveis que representam aproximadamente 83% da produção nacional, conforme dados apurados pela ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis) em 2024. Esses combustíveis são derivados do petróleo, um recurso natural não renovável, originado da decomposição de materiais orgânicos. Segundo Wang et al. (2023), a queima de combustíveis fósseis gera diversas substâncias tóxicas que causam danos à natureza e à saúde humana, capazes de favorecer o surgimento de doenças respiratórias e até câncer, além de graves consequências à natureza, como o aquecimento global que leva a mudanças climáticas. Os principais poluentes encontrados na atmosfera hoje são: Óxidos de nitrogênio (NO_X), dióxido de enxofre (SO_2), monóxido de carbono (CO) e material particulado (MP). Dados publicados pela CETESB (Companhia Ambiental do Estado de São Paulo), em 2022, através do plano de controle de poluição veicular, apontam que em São Paulo a frota de veículos era de 15 milhões (entre automóveis, ônibus, caminhões, motocicletas e comerciais leves), responsáveis por produzir cerca de 150.000 toneladas de óxidos de nitrogênio conforme apresentado na Figura 1.

Figura 1 – Evolução das emissões de poluentes no estado de São Paulo no período de 2006 a 2021.



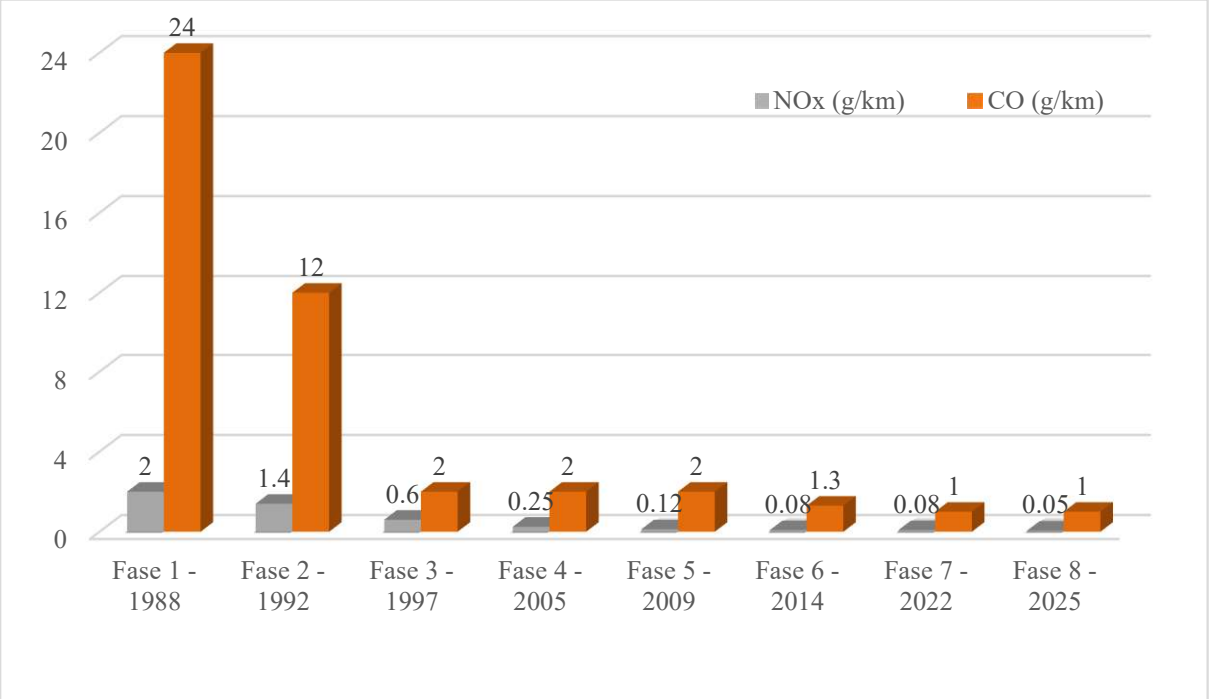
Fonte: CETESB (2022).

Com o passar dos anos e diante das evidências dos danos causados por esses poluentes, diversos países adotaram políticas com o intuito de reduzir os níveis globais de emissões e minimizar os impactos do uso de motores de combustão na sociedade e na natureza. Souza, et al., (2017), destacam o tratado de Paris, que foi assinado por mais de 190 países, incluindo países emergentes, como o Brasil, com o objetivo de avaliar as emissões geradas por cada nação e estabelecer metas para reduzir as mudanças climáticas decorrentes de ações antrópicas. As propostas foram apresentadas durante a COP21 (21ª Conferência das Partes da Convenção - Quadro das Nações Unidas sobre Mudança do Clima) realizada em Paris em 2015. Segundo Pereira (2023), atualmente os países adotam regulamentações extremamente rigorosas em relação à emissão de poluentes. Com destaque a EURO 7, que foi desenvolvida e será adotada pela União Europeia a partir do ano de 2026, e para programas similares em diversos países da América do Sul, como o Chile. No Brasil, a regulamentação aplicada é a PROCONVE (Programa de Controle da Poluição do Ar por Veículos Automotores), atualmente em sua oitava fase (L8), elaborada pelo CONAMA (Conselho Nacional do Meio Ambiente) e gerida e fiscalizada pelo IBAMA. A legislação

brasileira tem uma base técnica formada por conceitos inspirados em padrões internacionais especialmente da EPA (*Environmental Protection Agency*), dos EUA, e entrou em vigor a partir do ano de 2025. O objetivo é restringir a formação de poluentes em todos os veículos produzidos no país, além de estabelecer limites e diretrizes para todas as etapas da produção veicular.

A etapa atual da legislação adota quantidade de massa de poluente produzida por distância percorrida significativamente menores que as primeiras etapas elaboradas na década passada. O limite máximo de emissão de monóxido de carbono (CO), por exemplo, sofreu redução superior a 90% em relação à primeira fase (L1), implementada em 1988. Enquanto a primeira etapa permitia que fosse emitido até 24 g/km de CO durante o ciclo de condução urbano FTP-75 (*Federal Test Procedure*), a fase L8 passou a permitir 1 g/km para a mesma condição de condução, conforme apresentado na Figura 2, que destaca os limites permitidos de monóxido de carbono e óxidos de nitrogênio em cada etapa da PROCONVE. É importante ressaltar que houve uma alteração na metodologia de avaliação a partir da fase 7, em 2022, que passou a considerar em conjunto a emissão de NO_X + NMOG devido a sua reatividade, mantendo-se o valor limite de massa de poluentes da fase anterior da legislação.

Figura 2 – Limite de massa emitida de poluente por quilometro percorrido para veículos leves em cada etapa da legislação PROCONVE, adotada de 1988 a 2025.



Fonte: CETESB (2022).

Com restrições cada vez mais severas, o processo de desenvolvimento de novos motores demanda maiores esforços e investimentos por parte dos governos e das empresas que desenvolvem novas tecnologias na área automotiva. Assim, ferramentas de simulação computacional ganham cada vez mais importância nesse segmento, antes mesmo da concepção dos primeiros protótipos, por apresentarem baixa incerteza e evitarem gastos excessivos no processo de prototipagem. Teixeira (2015) afirma que as metodologias de modelagem matemática são capazes de auxiliar o desenvolvimento de motores. Um exemplo são os modelos de combustão, que podem contribuir para o estudo dos fenômenos físicos, químicos e termodinâmicos que ocorrem com os gases no interior do cilindro, bem como para a análise da formação de poluentes durante o processo de operação do motor. Além disso, ferramentas as ferramentas de simulação computacional possibilitam a redução de custo dos processos experimentais. Essas metodologias preditivas minimizam o tempo de projeto e calibração dos mapas dos motores, impactando diretamente nos custos de desenvolvimento.

1.1 JUSTIFICATIVA

Grandes esforços, como a elaborações de normas e metodologias precisas para o controle de emissão de poluente, além da adoção do crédito de carbono, que são comercializados pelas empresas que alcançarem redução de CO_2 então sendo realizados, não somente no setor automotivo, mas na indústria de forma geral. Programas governamentais de incentivo como o Mover, apoiam projetos de inovação e desenvolvimento em toda a cadeia de produção automotiva, gerando benefícios fiscais às empresas que apresentarem resultados sustentáveis. Outra linha de estudo e desenvolvimento importante é o uso de combustível renovável e a eletrificação veicular. A previsão é de que, em 2034, cerca de 300 milhões de veículos elétricos em circulação no mundo, o que equivalerá a aproximadamente 15% da frota global, conforme divulgado pelo ministério de Minas e Energia através do Estudos do Plano Decenal de Expansão de Energia 2034 (Ministério de Minas e Energia, 2024). Todos esses esforços mostram o engajamento dos governos e empresas na contenção das mudanças climáticas.

O Brasil dispõe de uma ampla gama de biocombustíveis, com destaque para o etanol hidratado e o biodiesel, que amplia as possibilidades do país para alcançar uma mobilidade urbana mais limpa, especialmente em aplicações como veículos híbridos abastecidos exclusivamente com combustível retornável ou motores movidos somente com o biocombustível. Desde 2003, a frota veicular brasileira conta com os veículos *flex fuel*, que podem ser abastecidos com etanol ou gasolina em qualquer proporção. O Brasil é o segundo

maior produtor de etanol do mundo e, em 2019, junto com os Estados Unidos, foi responsável por cerca de 85% da produção global. Embora o etanol conte com algumas desvantagens em relação à gasolina, como menor densidade energética durante o processo de combustão, apresenta uma alta octanagem e desempenho regular em motores de ignição por centelha (Puricelli, 2021). A Tabela 1 apresenta as principais propriedades da gasolina e do etanol.

Tabela 1 – Principais propriedades químicas do etanol e da gasolina.

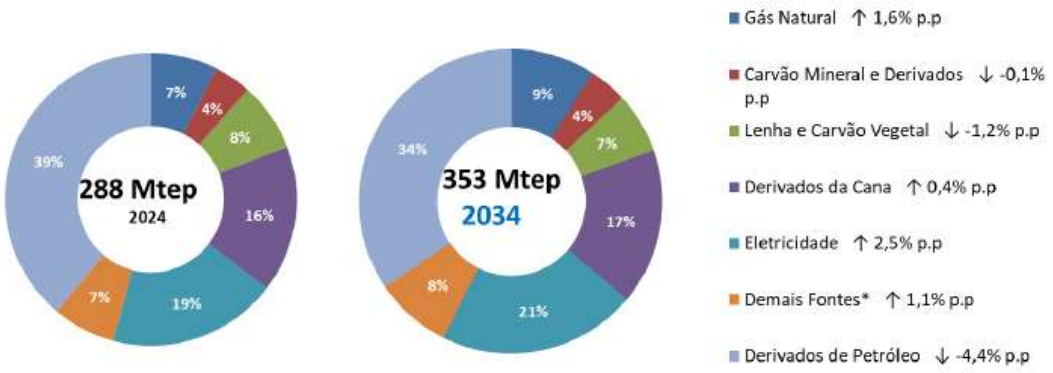
	Fórmula	Densidade (kg/m^3)	Calor de Latente de Vaporização (kJ/kg)	PCI (MJ/kg)	RON	MON
Etanol	C_2H_5OH	0,79	840	26,9	107	89
Gasolina	$C_nH_{1.87n}$	0,72 – 0,78	305	44,0	92 - 98	80 - 90

Fonte: Ganesan (2004).

A ampla gama de fontes de energia no Brasil, que incluem os biocombustíveis, justifica a realização de estudos focados em motores a combustão interna, com o objetivo de buscar melhorias do consumo de combustível e redução na geração de poluentes. No cenário nacional, o etanol destaca-se como um biocombustível com grande potencial para ampliar as alternativas de mobilidade limpa no país. A Figura 3 mostra que, atualmente, os combustíveis derivados da cana de açúcar (etanol e biogás) representam a 3ª maior fonte de energia do Brasil, correspondendo a cerca de 16% da matriz energética, com projeções para crescimento. Em contrapartida, o consumo dos combustíveis derivados do petróleo apresenta expectativa de redução para os próximos dez anos. Assim, modelos matemáticos com capacidade de estimar a concentração de poluentes produzidos por um motor a combustão interna podem contribuir de forma significativa no desenvolvimento de motores mais limpos. Quando bem calibrados, os modelos de combustão apresentam resultados com baixa incerteza comparado aos resultados experimentais, auxiliando estudos voltados à redução das emissões de poluentes e colaborando para respostas mais eficazes diante das ameaças associadas às mudanças climáticas, tanto no Brasil quanto no restante do mundo.

Huang X. et al., (2022) afirma que, somente entre os dez países mais impactados pelas mudanças climáticas em 2019, registraram mais de 4.000 mortes e prejuízo financeiro superior a US$ 42 bilhões, sendo os principais eventos relacionados a tempestades, ciclones tropicais inundações e incêndios florestais, fatos que justificam as medidas tomadas por diversos países.

Figura 3 – Projeção de consumo final das principais fontes de energia do Brasil para 2034.



Fonte: EPE (2024).

Ganesan (2004) afirma que os óxidos de nitrogênio (NO_X) são poluentes altamente tóxicos e, portanto, muito indesejáveis. Formado basicamente pela reação do oxigênio e nitrogênio do ar admitido, ou entre o oxigênio e os reagentes do combustível, após a exposição a temperaturas elevadas dentro da câmara de combustão durante a operação do motor. Esses poluentes contribuem diretamente para a acidez da chuva, formação de SMOG (nevoa de oxidantes fotoquímicos), e para danos na camada de ozônio. Além disso, devido a sua elevada capacidade de formar ozônio troposférico por meio de reação com compostos orgânicos voláteis (VOCs) presentes na atmosfera, justificam-se grandes esforços para conter a produção desse poluente, assim, o algoritmo numérico proposto será desenvolvido para a determinação da concentração de óxido nítrico (NO) emitido por motores a combustão interna de ignição por centelha.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Desenvolver um algoritmo interativo, utilizando o Software Scilab, para a determinação da concentração de óxido nítrico (NO) emitido durante o funcionamento de motores a combustão interna de ignição por centelha, utilizando como base teórica modelos termodinâmicos e o mecanismo térmico de Zeldovich.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

A formação de NO está diretamente ligada a pressão e temperatura dos gases na câmara de combustão. Portanto, para alcançar o objetivo geral, propõe-se:

1. Aplicar a função de Wiebe para determinação da taxa de liberação de energia do motor, utilizando uma metodologia numérica para estabelecer o parâmetro de forma mais adequado a cada condição de operação do motor;

2. Determinar a curva de pressão dos gases no interior da câmara de combustão do motor com base em parâmetros específicos de combustão, condições de admissão e operação do motor. Os parâmetros considerados são: MBF10, MBF50, MBF90, pressão máxima dos gases na câmara de combustão (P_{MAX}), vazão de ar admitido, vazão de combustível injetado, pressão e temperatura dos gases admitidos no fechamento de válvula de admissão;

3. Aplicar modelos de combustão para a determinar a temperatura dos gases no interior do cilindro em função da posição angular do virabrequim, nas condições operacionais selecionadas para o estudo;

4. Validação dos dados determinados através do algoritmo utilizando a metodologia proposta com os dados experimentais.

3 REVISÃO BIBLIOGRAFICA

Os motores a combustão interna são máquinas térmicas que convertem a energia química do combustível em energia mecânica. Embora existam outras fontes de energia, como a elétrica e a atômica, este trabalho concentra-se em motores alimentados por combustíveis fósseis. Denomina-se de combustão interna os motores em que a mistura ar/combustível admitida é queimada dentro do cilindro, sendo essa mistura o fluido de trabalho responsável por realizar o deslocamento do pistão (Brunetti, 2018). Os motores podem ser classificados como:

- Alternativos - motores de ignição por centelha (ciclo Otto) ou por ignição por compressão (ciclo Diesel);
- rotativos – Motores a gás e Motores Wankel;
- De impulso – Motores a jato e foguetes.

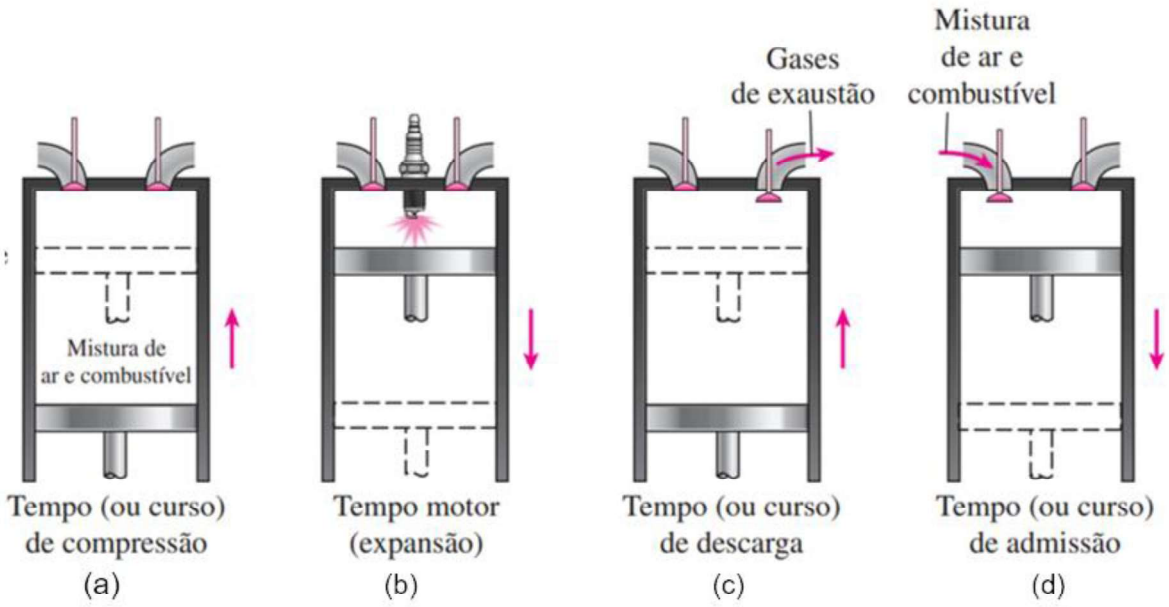
Segundo Çengel (2014), os motores alternativos são compostos basicamente por um conjunto cilindro-pistão, sendo uma máquina térmica muito versátil e que tem aplicação em diversos segmentos. Está presente como motopropulsores na maioria dos automóveis, caminhões, motocicletas, aviões, navios, geradores, máquinas industriais, além de diversas outras aplicações.

Os primeiros motores empregados eram de combustão externa, operando por meio da queima de carvão para gerar vapor d'água e, com isso, movimentar o pistão e produzir o trabalho mecânico. Posteriormente, surgiram os motores a combustão interna, considerados os primeiros modelos comerciais. Um dos primeiros exemplares foi desenvolvido por J. J. E. Lenoir, em 1860, e operavam sem compressão antes da combustão, alcançando uma eficiência de apenas 5%. Em 1867, Otto e Langen desenvolveram um motor atmosférico mais eficiente, atingindo cerca de 11% de eficiência, embora com dimensões e peso muito elevados. Na sequência, Otto propôs o ciclo de quatro tempos composto por: admissão, compressão, combustão e escape, revolucionando a indústria dos motores de combustão interna. Esse avanço reduziu significativamente o peso e o volume dos motores, favorecendo sua ampla adoção, com cerca de 50.000 unidades produzidas na Europa e EUA até 1890. Ressalta-se que, em 1884, descobriu-se que Alphonse Beau de Rochas havia descrito os princípios do ciclo de 4 tempos em 1862, em uma patente não publicada na França, assim, a patente de Otto foi invalidada na Alemanha (Heywood, 2019).

3.1 MOTORES DE 4 TEMPOS

Os motores alternativos de ignição por centelha, também conhecidos como motores de ciclo Otto, foram nomeados em homenagem a Nikolaus August Otto, que construiu um motor de quatro tempos bem-sucedido em 1876. Os motores que operam segundo esse ciclo realizam quatro cursos do pistão, com 180° de rotação cada, totalizando 720° por ciclo termodinâmico ou o equivalente a duas revoluções do eixo de manivelas. O ciclo é composto por quatro tempos como apresentado na Figura 4:

Figura 4 – Ciclo de operação para motores de 4 tempos.



Fonte: ÇENGEL (2014).

(a) Compressão: Após atingir o PMI (ponto morto inferior), o pistão sobe, comprimindo essa mistura, enquanto as válvulas permanecem fechadas;

(b) Expansão: Após atingir o ponto morto superior (PMS), a vela de ignição gera uma faísca que inflama a mistura, aumentando pressão e temperatura. A expansão dos gases empurra o pistão para baixo, gerando trabalho útil;

(c) Exaustão: O pistão sobe novamente, expulsando os gases queimados através da válvula de escape;

(d) Admissão: O pistão desce, a válvula de admissão é aberta e permite a entrada da mistura de ar e combustível, para os veículos de injeção indireta, ou somente ar para os motores de injeção direta. Para esses motores, o tempo de injeção de combustível pode variar dependendo da estratégia adotada na calibração do motor.

Durante o tempo de exaustão, a pressão do cilindro permanece ligeiramente acima da atmosférica, enquanto no tempo de admissão, situa-se um pouco abaixo dessa referência. O ciclo então se reinicia, garantindo a conversão da energia química do combustível em trabalho mecânico (Çengel, 2014).

As etapas que compõem o ciclo ideal para o motor do ciclo Otto contemplam os tempos de admissão, compressão, expansão e escape, representadas graficamente nos diagramas de pressão em função do volume (Figura 5-a) e temperatura em função da entropia (Figura 5-b). O ciclo considera algumas premissas fundamentais:

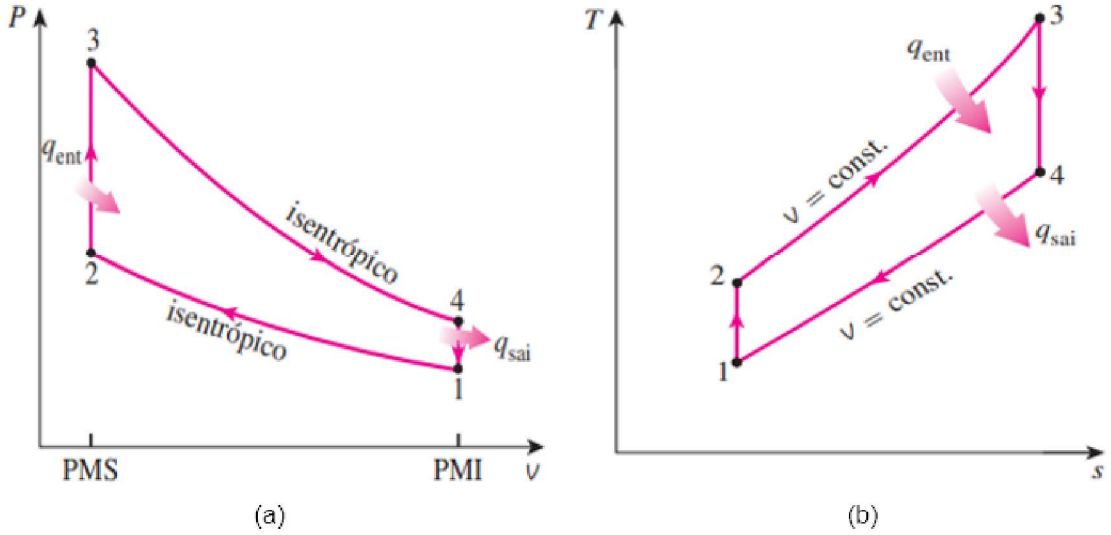
(1) O fluido de trabalho comporta-se como um gás ideal;

(2) Ocorre o fornecimento de calor a volume constante entre a etapa 2 e 3 apresentada nos diagramas da Figura 5.

(3) O processo de expansão isentrópico (3 > 4). Após a expansão é rejeitado calor a volume constante, processo ocorre entre as etapas 4 e 1;

(4) assume-se uma quantidade mássica constante em todo ciclo, desprezando possíveis vazamentos.

Figura 5 – Representação do ciclo Otto ideal: (a) diagrama pressão-volume (P–v); (b) diagrama temperatura-entropia (T–s).



Fonte: ÇENGEL (2014).

Os processos que ocorrem durante o ciclo são irreversíveis e descritos abaixo:

1 – 2: Compressão adiabática isentrópica;
2 – 3: Adição de calor a volume constante;
3 – 4: Expansão adiabática isentrópica;
4 – 1: Perda de calor a volume constante.

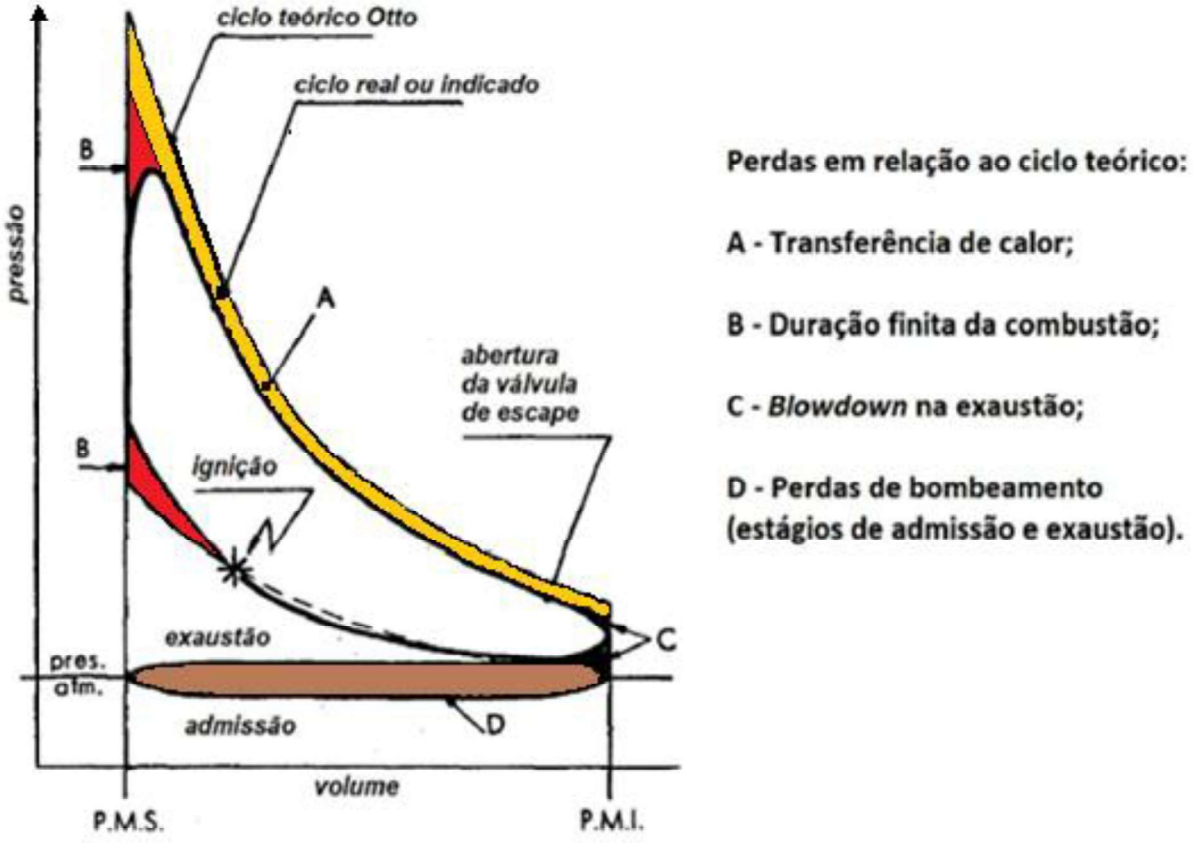
O processo ideal descrito na Figura 5 não corresponde ao comportamento real dos motores Otto, devido às simplificações adotadas no modelo ideal que não são verificadas na prática. À medida que o ciclo ocorre, os fenômenos que foram negligenciados afetam significativamente o comportamento do processo no volume de controle, resultando em desvios ao longo de cada etapa. Heywood, (2019) aponta as seguintes diferenças entre o ciclo real e ideal:

- Transferência de calor para as paredes do cilindro, o que reduz a pressão máxima atingida no ciclo real;
- Combustão apresenta duração finita e durante essa etapa a ocorre a variação do volume;
- Ocorrência de *blowdown* na exaustão;
- Fluxo de massa para as fendas dos anéis de segmento do pistão, gerando vazamentos e efeito de fenda;

- Parte da mistura ar/combustível não é queimada totalmente e reduz a quantidade de energia liberada durante o processo.

A Figura 6 apresenta o diagrama P-v, no qual é possível comparar graficamente o ciclo ideal e o ciclo real.

Figura 6 – Comparativo do ciclo Otto teórico (ideal) e ciclo Otto Real.

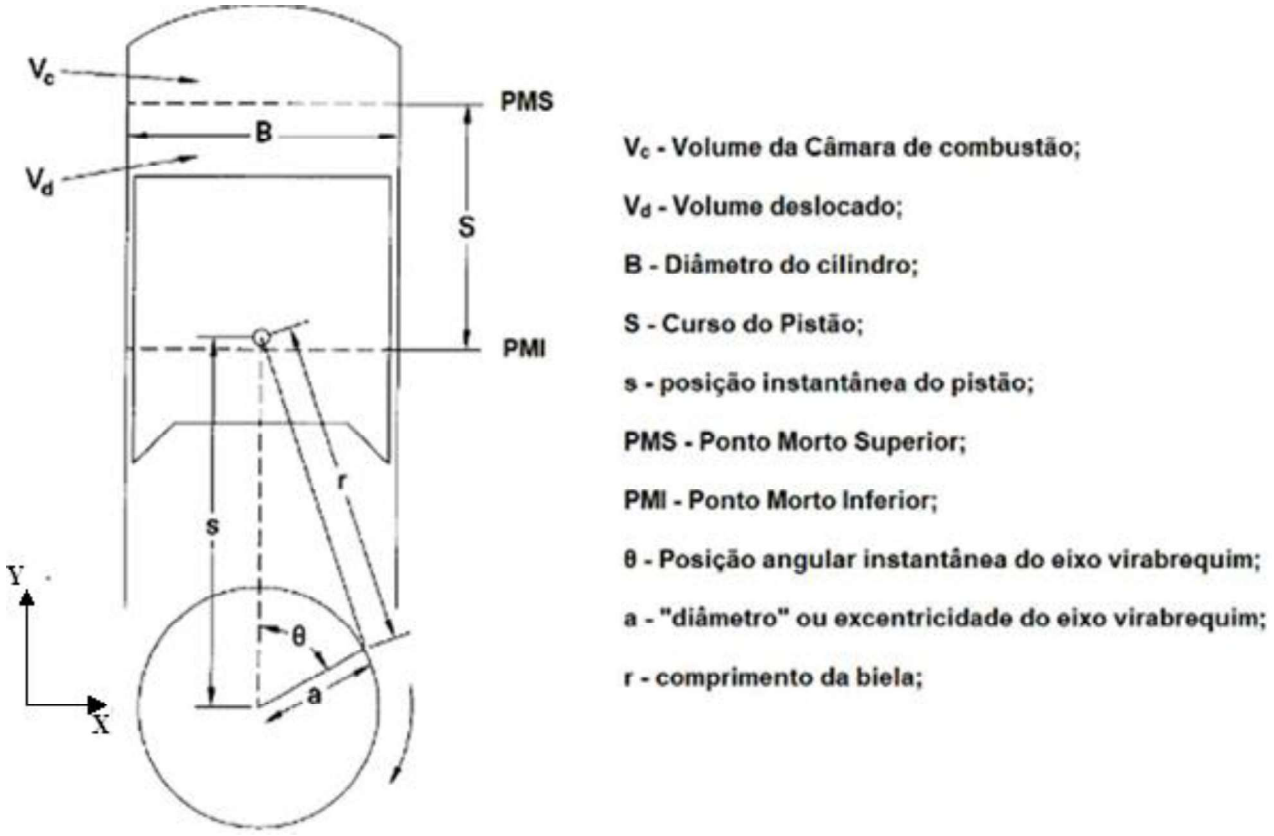


Fonte: Adaptado GIACOSA (1986).

3.3 CARACTERISTICA GEOMETRICA DO MOTOR

As características geométricas do motor exercem influência direta sobre sua operação e sobre o processo de combustão. Esses aspectos são fundamentais para o cálculo de parâmetros relevantes, como o volume deslocado no cilindro, especialmente nas análises dos fenômenos que ocorrem ao longo do ciclo termodinâmico. A Figura 7 apresenta as principais variáveis geométricas consideradas nesse contexto.

Figura 7 – Características geométricas do motor.



Fonte: Adaptado PENHA (2022).

Segundo Penha (2022) o volume instantâneo do motor é função da posição instantânea do motor e pode ser definido a partir dos dados geométricos. Definindo então a posição instantânea do motor através da Equação 1:

$$s(\Theta) = (\Theta) + (r^2 - a^2 sen^2(\Theta))^{1/2} \quad (1)$$

Após determinar a posição angular do pistão, é possível calcular o volume instantâneo deslocado através da Equação 2:

$$V(\Theta) = V_c + A_c[r + a - s(\Theta)] \quad (2)$$

Onde:

A_c – Area superficial do cilindro (m^2);

r – Comprimento da biela (m);

a – Comprimento da manivela do virabrequim (m);

V(Ɵ) – Volume instantâneo deslocado em função do ângulo do virabrequim.

Os dados obtidos através das características do motor, possibilitam o cálculo da razão volumétrica de compressão, uma propriedade construtiva que influência diretamente na eficiência térmica do sistema. Essa razão é definida pela relação entre o volume total no ponto morto inferior (PMI), correspondente à soma do volume da câmara de combustão e do volume deslocado, e o volume no ponto morto superior (PMS), que representa exclusivamente o volume da câmara de combustão. A Equação 3 apresenta essa relação matemática.

$$r_c = \frac{V_C + Vd}{V_C} \tag{3}$$

3.4 COMBUSTÍVEIS

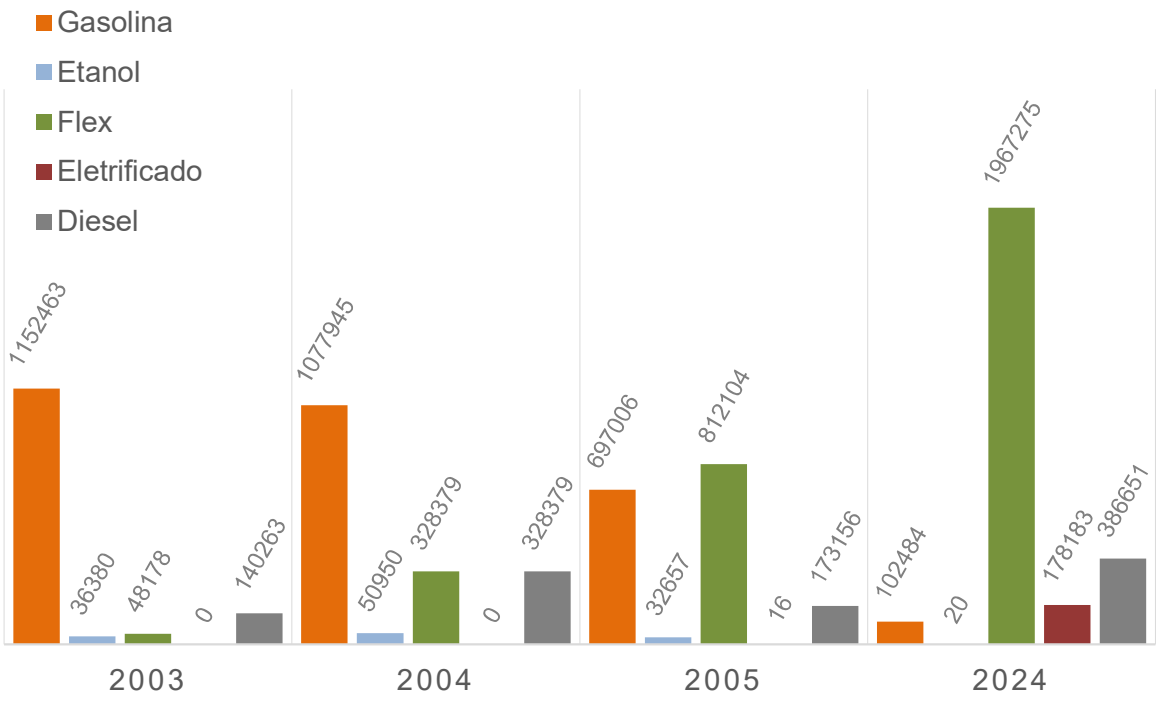
Os principais combustíveis utilizados em motores a combustão interna são o diesel, empregado em motores com ignição por compressão, e a gasolina, usada em motores com ignição por centelha (ANFAVEA, 2025). Em muitos países, é comum a adoção de misturas desses combustíveis fósseis com biocombustíveis. A gasolina, por exemplo, costuma receber a adição de etanol; já o diesel pode conter percentuais de biodiesel em sua composição.

Enquanto a gasolina e o diesel são derivados do petróleo, o etanol é obtido a partir da fermentação da cana-de-açúcar ou de outras biomassas. O biodiesel, por sua vez, é um óleo extraído principalmente de fontes vegetais. O Brasil foi um dos países pioneiros na aplicação de biocombustíveis e continua investindo na busca por alternativas aos combustíveis fósseis. Um marco importante nesse processo foi o programa Proálcool. Diante de uma crise mundial do petróleo, uma iniciativa envolvendo fabricantes de automóveis, instituições acadêmicas e o governo foi adotada, que mais tarde resultaria no programa oficial.

Em 2003, começaram a ser fabricados os automóveis *flex fuel*, que rapidamente se tornaram populares no país. Esses motores funcionam com qualquer proporção de mistura entre gasolina e etanol. Dados divulgados pela ANFAVEA (2025), no anuário da Industria automobilística Brasileira, mostra a quantidade de veículos emplacados a cada ano separados pelo tipo de combustível que é utilizado por cada um. O Gráfico apresentado na Figura 8,

mostra o crescimento da quantidade de veículos leves *flex fuel* emplacados, já no primeiro ano houve um crescimento considerável, passando de 3% dos veículos emplacados em 2003 para 18% no ano seguinte. No ano de 2024 os veículos leves *flex fuel* representam 75% dos emplacamentos, o que demostra a grande adesão desse tipo de motor.

Figura 8 – Veículos leves e comerciais leves emplacados por ano para cada tipo de combustível.



Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

3.4.1 GASOLINA

A gasolina é composta por hidrocarbonetos parafínicos (normais ou ramificados), olefínicos, naftênicos e aromáticos formados por cadeias de carbono que variam de 4 a 12 átomos. Esta composição varia principalmente devido à origem do petróleo e aos processos de produção que são utilizados. Entre as principais características da gasolina estão: alta velocidade de queima e alta volatidade, que influencia diretamente na sua capacidade de inflamar, como é um combustível que vaporiza a temperatura ambiente, tem impacto positivo direto na partida a frio (Ganesan, 2004).

No Brasil, são comercializados dois tipos de gasolinas: tipa A e tipo C. A gasolina do tipo A é pura e destinadas exclusivamente aos distribuidores; e a gasolina do tipo C recebe adição de etanol antes de ser disponibilizada ao consumidor final.

3.4.2 ETANOL

O etanol é um biocombustível que pode ser obtido a partir da fermentação natural de açúcares (álcool de 1ª geração) ou pela hidrolise enzimática da celulose (álcool de 2ª geração). A principal biomassa brasileira é a Cana de Açucar, o milho é outro exemplo de matéria prima utilizada. A partir desse processo gera então uma substância pura, formada exclusivamente pelas moléculas C_2H_5OH que recebe a adição de água para alcançar sua forma comercial. No mercado brasileiro existem duas variações desse combustível: etanol anidro e etanol etílico hidratado (E100). A legislação define qual o percentual permitido de água em cada variação do combustível, a RESOLUÇÃO ANP Nº 907, DE 18 DE NOVEMBRO DE 2022, define até 7,5% em massa de água para o etanol hidratado combustível (EHC) e até 0,7% em massa para o Etanol anidro combustível (EAC). O etanol possui propriedades antidetonantes (anti-knock), devido ao seu alto calor latente de vaporização quando comparado com a gasolina, 840 kJ/kg e 305 kJ/kg respectivamente, com isso, produz uma redução da temperatura da câmara de combustão que minimiza a tendência a detonação. Apresenta elevada octanagem, com um RON de 107, enquanto a gasolina tem RON de 92~98. O etanol apresenta apenas cerca de metade da densidade energética da gasolina, seu alto calor latente de vaporização, embora contribua para o resfriamento da mistura, dificulta a partida a frio. Além disso, possui natureza corrosiva, o que exige cuidados específicos nos sistemas de alimentação e materiais utilizados (Brunetti, 2018).

3.4.3 ESTEQUIOMETRIA

Na etapa de desenvolvimento dos cálculos das propriedades dos gases queimados e não queimados durante o processo de combustão, a estequiometria dos combustíveis é importante para o modelo, obtida através da resolução da equação química da combustão, que é baseada na lei da conservação da espécie química. Para os cálculos é adotado a composição de 79% de nitrogênio (N_2) e 21% de oxigênio (O_2) em volume para ar seco admitido, desconsiderando a presença de outros gases em menor proporção.

3.4.3.1 GASOLINA TIPO A

É utilizado o iso-octano (C_8H_{18}), um dos principais componentes da gasolina como combustível de referência para a gasolina do tipo A. Essa adoção é amplamente utilizada como em estudos desenvolvidos em centros de pesquisas e empresas focadas no aprimoramento de motores. Para a gasolina tipo A, resolve-se a equação química da combustão completa estequiométrica, conforme a Equação 4.

$$C_8H_{18} + 59{,}66.(0{,}79.N_2 + 0{,}21.O_2) = 9{,}00.H_2O + 47{,}16.N_2 + 8{,}00.CO_2 \quad (4)$$

3.4.3.2 ETANOL

Para o etanol é resolvido a equação química da combustão completa estequiométrica para o C_2H_5OH, Equação 5:

$$C_2H_5OH + 14{,}31.(0{,}79.N_2 + 0{,}21.O_2) = 3{,}00.H_2O + 11{,}31.N_2 + 2{,}00.CO_2 \quad (5)$$

3.4.3.3 GASOLINA TIPO C

A gasolina do tipo C, também conhecida como gasolina comum, é composta pela gasolina tipo A com adição de um percentual de etanol anidro. A lei Nº 14.993, de 8 de outubro de 2024, fixa o percentual permitido de álcool etílico anidro combustível adicionado à gasolina C em 30%, em volume, para todo o território nacional. Permitindo que esse percentual varie de 22% a 35%, desde que constatada a viabilidade técnica. O combustível utilizado nas provas do Motor 2 continha a concentração de 25% de etanol em volume na sua composição, conforme a análise do teor de etanol realizada, referindo-se então como E25. Assim, pode-se resolver a equação química da combustão completa estequiométrica conforme apresentado na Equação 6:

$$(0{,}25.C_2H_5OH + 0{,}75.C_8H_{18}) + 48{,}32.(0{,}79.N_2 + 0{,}21.O_2) = 7{,}50.H_2O + 38{,}20.N_2 + 6{,}50.CO_2 \quad (6)$$

3.4.5 RELAÇÃO AR/COMBUSTÍVEL

Um parâmetro que influencia diretamente o funcionamento do motor é a relação ar/combustível, também chamada de AFR (*Air Fuel Ratio*), que é utilizada pela central do motor para o gerenciamento de operação. É uma razão entre a massa de ar admitido e o combustível injetado durante a combustão. Baseado nas equações estequiométricas para cada combustível, conforme apresentado nas Equações 4 e 5, é possível obter a relação ar/combustível estequiométrica (AFR_{est}) para cada combustível. O etanol apresenta uma relação de 8,96:1, enquanto o iso-octano utiliza 15,07:1 (considerando que a gasolina é modelada com as propriedades do iso-octano). Com os dados obtidos, é possível estimar o AFR_{est} para o E25.

$$AFR_{est_E25} = \frac{m_{E100}.AFR_{E100} + m_{gas}.AFR_{gas}}{m_{E100} + m_{gas}} \quad (7)$$

m_{E100} = Massa em gramas (g) de etanol presente em 1 mol;

m_{gas} = Massa em gramas (g) de iso-octano presente em 1 mol;

AFR_{E100} = Razão ar/combustível estequiométrico do etanol;

AFR_{gas} = Razão ar/combustível estequiométrico do iso-octano;

Considerando a Equação 7, obtém-se o AFR_{EST_E25} de aproximadamente 12,88:1.

Uma alternativa para avaliar a operação do motor é o fator lambda (λ), que indica uma mistura rica (excesso de combustível) ou uma mistura pobre (excesso de ar) através da relação do AFR de operação e o AFR estequiométrico.

$$\lambda = \frac{AFR}{AFR_{EST_E25}} \quad (8)$$

3.5 MODELOS DE COMBUSTÃO

Os fenômenos químicos e termodinâmicos presentes nos ciclos dos motores são complexos, o que torna os modelos de combustão ferramentas essenciais no desenvolvimento e na calibração desses sistemas. Esses modelos têm como objetivo principal descrever com precisão o comportamento da combustão, auxiliando na compreensão do funcionamento do motor, na identificação de possíveis falhas durante a operação e na redução dos custos experimentais. São importantes na análise de fenômenos como a taxa de queima do combustível, atraso e evolução da combustão e estudos da emissão de poluentes. Melo (2012) realizou uma ampla pesquisa bibliográfica e destacou Heywood (1980), James (1984) e Ramos (1989) como umas das principais referências na literatura para o tema. Heywood, (2019) divide os modelos em três categorias: zero-dimensional, quasi-dimensional e multidimensional.

Para Heywood (2019), o modelo zero dimensional é baseado em equações termodinâmicas, e sua variável independente é o tempo. Utilizando submodelos empíricos para a obtenção da taxa de queima do combustível. A abordagem adotada no modelo quasi-dimensional, trata os gases como dois volumes de controle que são a zona da mistura não queimada, e a zona da mistura queimada. Os dois volumes de controle apresentam composição e temperaturas diferentes. Os modelos multidimensionais são mais complexos e demandam maior capacidade computacional, embora forneçam informações mais detalhadas do sistema. Utilizam equações diferenciais de conservação de energia, massa, quantidade de movimento e espécie química, aplicando modelos que descrevem fenômenos como os escoamentos turbulentos e de camada limite, reações químicas envolvidas etc.

Segundo James (1984), os modelos são divididos nas seguintes classificações: zero-dimensional ou termodinâmico, unidimensional, multidimensional e híbrido. Os modelos zero-dimensional são subdivididos em três. O modelo de taxa de queima definida, que usa a função de Wiebe ou função similar para descrever a taxa de queima de combustível. O segundo subgrupo, é o modelo de frente turbulenta. O último subgrupo chamado de modelo de zona dividida, é equivalente ao modelo quasi-dimensional que é defendido por Heywood (1980). Os modelos híbridos buscam reduzir a complexidade entre o modelo de duas zonas e o modelo multidimensional.

Ramos (1989) define os modelos em quatro classificações, que se comparam como as teorias propostas por Heywood (1980). Modelo de zona-simples, equivalente ao modelo

zero-dimensional, modelo multizona que equivale ao modelo quase-dimensional, e os modelos unidimensionais e multidimensionais, similares ao modelo multidimensional.

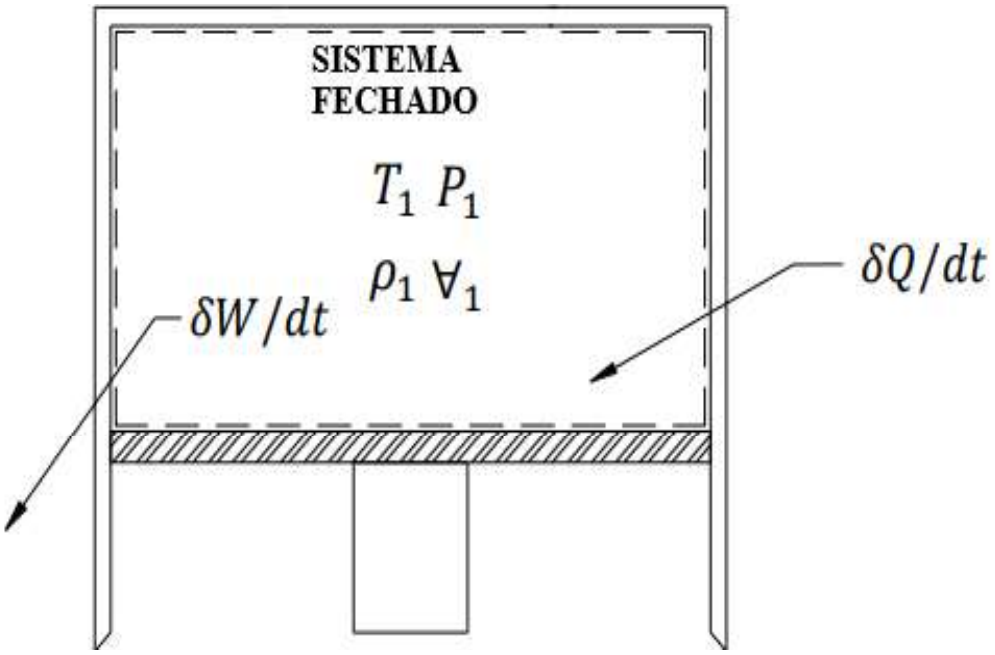
3.5.1 MODELO ZERO-DIMENSIONAL OU TERMODINÂMICO

O modelo zero dimensional é baseado na 1ª lei da termodinâmica e na lei dos gases ideias, e apresenta natureza empírica. É amplamente utilizado para analisar o processo de combustão durante a operação do motor, desde o fechamento da válvula de admissão, que caracteriza o início da fase de compressão, até o término do ciclo de expansão. A variável temporal é representada pela posição do virabrequim ou o tempo.

Esse modelo é capaz de auxiliar na previsão de parâmetros importantes, como a temperatura e pressão dos gases na câmara de combustão. Um exemplo de aplicação é a função de Wiebe, que é bastante aplicada para análises macroscópicas. O modelo considera a câmara de combustão como um volume de controle, cujo pistão é um limite variável, que altera o volume deslocado no cilindro em função do ângulo do virabrequim. Ainda considera que o fluxo de massa que possa existir através dos anéis dos pistões é desprezível. Como apresentado na Figura 9 (Texeira, 2015).

O fluxo de trabalho é governado pela lei dos gases ideias, no entanto, as propriedades químicas no sistema variam durante todo o processo. A composição química varia com o desenvolvimento da combustão e o calor específico a volume constante (C_v) torna-se função da temperatura dentro da câmara de combustão. Inicialmente o fluido de trabalho é composto por vapor de combustível e ar seco, ao final da combustão é considerado como produto CO_2, N_2 e H_2O.

Figura 9 – Esquema do volume de controle definido para a Câmera de combustão para o modelo zero-dimensional.



Fonte: Adaptado. TEIXEIRA, (2015).

Baldi (2015) desenvolveu um trabalho utilizando o modelo zero-dimensional com a abordagem de valor médio para simulação de motores Diesel marítimos, o a implementação foi no ambiente do MATLAB/Simulink. O modelo considera o ciclo fechado de um cilindro do motor com a abordagem zero-dimensional, enquanto o ciclo aberto e outros componentes são representados pelo conceito de valor médio. Essa combinação permite estimar parâmetros de desempenho do motor, incluindo fenômenos que ocorreram dentro do cilindro, com menor tempo de execução e demanda computacional. A validação foi feita comparando os resultados com testes experimentais em um motor Diesel marítimo de quatro tempos, apresentando resultados alinhados com o objetivo do trabalho.

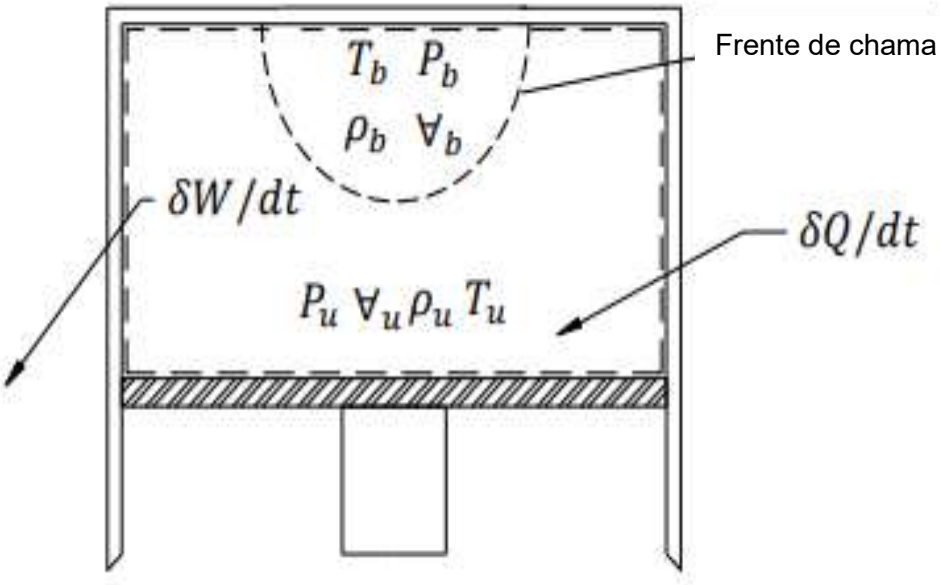
Floch (2018), realizou um estudo para modelar motores de combustão interna na indústria automotiva, e utilizou um modelo fenomenológico zero-dimensional (0D) proposto para prever a taxa de liberação de calor. O modelo busca prever a taxa de liberação de calor a partir da abordagem de combustão turbulenta, considerando variáveis como a geometria da câmara de combustão, a intensidade da turbulência e os efeitos dos gases residuais. A validação foi conduzida com dados experimentais de um motor monocilíndrico, demonstrando

concordância para diferentes condições, como taxa de compressão, tempo de abertura das válvulas, intensidade da turbulência e razão de equivalência.

3.5.2 MODELO QUASE-DIMENSIONAL

Os modelos quasi-dimensionais são preditivos e, devidamente calibrados, oferecem boa capacidade para estimar a performance dos motores de ignição por centelha. Nesse tipo de abordagem, a câmara de combustão é considerada um sistema fechado, tendo o pistão como barreira móvel, similar ao modelo zero dimensional. O conteúdo interno do cilindro é tratado como gás ideal, os gases são tratados como dois volumes de controle distintos. A porção de mistura não queimada é composta por ar seco e vapor de combustível, e denominada *unburned*, e a porção de mistura queimada é composta pelo produto da combustão estequiométrica completa do combustível, e tratada como *burned* e são representadas esquematicamente na Figura 10. As duas regiões trabalham à mesma pressão, no entanto, apresentam composição e temperaturas diferentes, assumindo propriedades específicas para cada fração. A combustão tem início com a ignição da centelha, propagando-se a partir da frente de chama e expandindo pelo volume de controle até consumir toda a mistura não queimada, considerado o final do processo de combustão (Zou, 2021).

Figura 10 - Esquema do volume de controle definido para a câmera de combustão para o modelo quasi-dimensional considerando as duas zonas.



Fonte: Adaptado TEIXEIRA (2015).

Rao (2021) analisou o comportamento de um motor alimentado com gás natural enriquecido com hidrogênio em diferentes proporções de mistura, percentual de EGR e temperaturas de admissão. Os resultados obtidos com o modelo quasi-dimensional foram comparados aos dados coletados experimentalmente com um erro médio de 1,32%.

Zou (2021) desenvolveu um modelo de duas zonas capaz de estimar a ocorrência de *Knock* em um motor marítimo bicombustível em três condições diferentes de operação. O estudo concluiu que todos os parâmetros impactam diretamente na probabilidade da ocorrência de *Knock*.

Schlichting (2022) aplicou o modelo quasi-dimensional para a previsão da octanagem de uma vasta gama de combustíveis utilizados durante a operação do motor. O modelo tem capacidade preditiva, alcançando uma variação máxima de 5 RON, variável que está diretamente ligada ao *Knock*.

3.6 FUNÇÃO DE WIEBE DE ESTÁGIO ÚNICO

A função de Wiebe de estágio único é uma abordagem que permite calcular a liberação de calor aparente, sendo uma ferramenta essencial na análise do processo de combustão. A função é frequentemente utilizada para obter o perfil de combustão dos motores PFI, embora na literatura é possível encontrar diversos estudos para motores de ignição por compressão. Este é um método empírico que estima a progressão da queima do combustível em função da posição angular do virabrequim (*crank-angle*) e apresenta uma relação entre demanda computacional e incerteza dos resultados razoável.

A curva da liberação de calor é caracterizada por um formato de “S”, como apresentado na Figura 11. A curva pode ser obtida através da Equação 9, que é uma relação entre o ângulo do virabrequim e os parâmetros da função (Merker, 2005).

$$X_b = 1 - exp\left[-\alpha\left(\frac{\theta-\theta_0}{\Delta\theta}\right)^{\omega+1}\right] \quad (9)$$

Na função de Wiebe, X_b representa a fração mássica queimada de combustível, é uma variável adimensional, onde, 0 representa que a combustão não iniciou e 1 representa que todo o combustível foi consumido. Os parâmetros “α” e “ω”, ambos adimensionais, correspondem respectivamente à eficiência da combustão e à forma da curva de liberação de calor. Segundo Merker (2005), para uma combustão com eficiência de conversão do

combustível em energia igual a 99,99%, o parâmetro de eficiência para a função de Wiebe pode ser considerado igual a 6,908, conforme apresentado na Tabela 2.

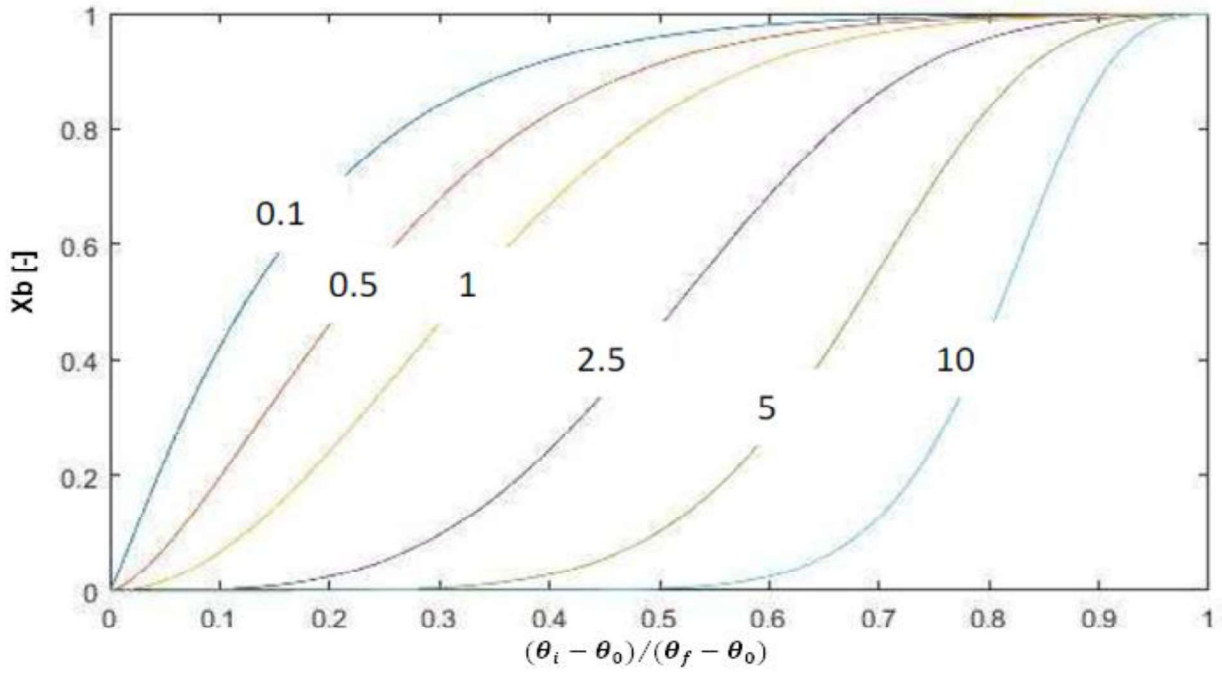
Tabela 2 - Parâmetro de eficiência da função de Wiebe para diferentes eficiências de conversão do combustível em energia.

η_{conv}	0,999	0,990	0,980	0,950
Parâmetro de eficiência (α)	6,908	4,605	3,912	2,995

Fonte: MERKER, (2005).

O parâmetro de forma (ω) influência na assimetria da distribuição de queima do combustível. Valores baixos de "ω" indicam uma combustão rápida, enquanto valores mais elevados estão associados a uma combustão mais tardia. A definição do valor mais adequado do parâmetro requer uma metodologia de obtenção mais criteriosa, uma vez que não há uma padronização eficaz na literatura que possibilita a aplicação a todas as condições de operação. Dessa forma, para cada condição analisada, o valor de "ω" é determinado individualmente.

Figura 11 – Comportamento da função de Wiebe devido a variação do parâmetro de forma "ω".



Fonte: PENHA, (2015).

Onde,

θ_i = Posição angular do virabrequim instantânea;

θ_0 = Posição angular do virabrequim no início da combustão;

θ_f = Posição angular do virabrequim no final da combustão;

Fangundez (2016) utilizou a função de Wiebe, com o objetivo de modelar a combustão em duas zonas de um motor de ciclo Otto PFI, abastecido com combustíveis de diferentes concentrações de etanol, além da aplicação de correlações de transferência de calor: Woschni, Hohenberg, Sitkei e Annand. E conclui que a correlação de transferência de calor de Sitkei e Annand apresentam resultados inaceitáveis, enquanto Hohenberg em combinação com Wiebe apresenta os resultados com menor desvio, adequados aos testes realizados experimentalmente. A metodologia de Woschni e Hohenberg apresentaram um fluxo de calor do gás para a paredes do cilindro e cabeçote de 2-3 MW/m^2, para o método de Sitkei e Annand valores abaixo de 1 MW/m^2.

Nagaraja (2014) investigou de forma numérica e experimental o desempenho e as emissões de poluentes de um motor 4 cilindros, com 993 cc, utilizando iso-butanol/gasolina em diversas concentrações. O objetivo principal do trabalho era modelar a combustão de combustíveis alternativos aplicando a função de Wiebe. Embora o efeito dos combustíveis com mais de 20% de iso-butanol não tenha gerado resultados satisfatórios, a simulação utilizando a função de Wiebe apresenta correlação com os dados experimentais.

Shibata (2019) desenvolveu um modelo baseado na função de Wiebe para aproximar a taxa de liberação de calor de um motor monocilindro turboalimentado de ignição por compressão equipado com um sistema de injeção *common rail* de alta pressão. Com o intuito de otimizar a combustão do diesel pré-mistura e alcançar alta eficiência térmica com um baixo ruído de combustão. Os resultados obtidos foram satisfatórios e confirmaram a viabilidade da estratégia para reduzir o ruído de combustão sem comprometer a eficiência térmica. Apresentando um erro médio absoluto entre a simulação e o teste experimental de 0,71% para a eficiência térmica indicada e um ruído de combustão de 1,28dBA.

3.6.1 DETERMINAÇÃO DO PARÂMETRO DE FORMA

O parâmetro de forma requer uma metodologia para obtenção mais criteriosa, uma vez que não há uma padronização eficaz na literatura, como ocorre para o parâmetro de eficiência, que possibilita sua aplicação de forma satisfatória a todas as condições de operação. Assim, para cada condição de operação analisada, o valor de "ω" é determinado individualmente. Para tal, foi utilizado um método de aproximação numérico que considera a duração de combustão ocorrendo de 0 a 1. Dessa forma, embora não seja possível determinar o instante exato em que ocorrem 10%, 50% e 90% da queima de combustível, por meio da Equação 9 é possível identificar o percentual correspondente da duração da combustão em que esses valores se manifestam. Com base nessa informação são calculados os coeficientes de referência (REF_{EXP} e REF_{CALC}) e determinado o valor do parâmetro de forma "ω" que apresenta menor diferença entre eles. As Equações 10 e 11 foram utilizadas para cálculo dos coeficientes numéricos de referência.

$$REF_{EXP} = \frac{MBF_{50} - MBF_{10}}{MBF_{90} - MBF_{50}} \tag{10}$$

$$REF_{CALC} = \frac{mbft_{50} - mbft_{10}}{mbft_{90} - mbft_{50}} \tag{11}$$

Onde,

MBF_X = Posição angular do virabrequim ou tempo que ocorre a queima de X% da fração de combustível medido experimentalmente (θ ou s);

$mbft_X$ = Proporção da duração de combustão que ocorre a queima de X% da fração de combustível calculado com base na função de Wiebe.

Após definição do "ω" é possível calcular o SOC (*start of combustion*) e converter a duração de combustão em posição angular do virabrequim. A Equação 12 foi utilizada para calcular o SOC:

$$SOC = MBF_{10} - (mbft_{10}.Dur_{combustao}) \tag{12}$$

Onde:

$Dur_{combustão}$ = Duração de combustão (θ)

3.7 COEFICIENTE POLITRÓPICO

O coeficiente politrópico (n) interfere diretamente na qualidade do modelo de duas zonas, portanto, é necessário realizar o cálculo durante o processo de combustão, sendo a etapa de compressão e expansão politrópica. O processo é caracterizado pela Equação 13.

$$PV^{\gamma} = Constante \tag{13}$$

Onde,

P = Pressão do cilindro;

V = Volume instantâneo do cilindro;

γ = Coeficiente politrópico.

Para o cálculo é necessário conhecer os dados de pressão e volume para dois pontos, conforme apresentado na Equação 14:

$$P_1 V_1^{\gamma} = P_2 V_2^{\gamma} \tag{14}$$

Ao aplicar o logaritmo dos 2 lados e isolando o n, obtém-se:

$$n = \frac{LOG\left(P(\theta_{ign})\right) - LOG\left(P(\theta_{ign} - 5°)\right)}{LOG\left(V(\theta_{ign} - 5°)\right) - LOG\left(V(\theta_{ign})\right)} \tag{15}$$

Onde,

θ_{ign} = Ângulo do virabrequim no momento da centelha

3.8 POLUIÇÃO ATMOSFERICA

Os motores a combustão interna são fontes emissoras de gases que impactam nas mudanças climáticas globais, sendo apontado como um dos principais contribuintes para os problemas ambientais encontrados atualmente. A utilização de combustíveis fosseis e a queima incompleta desses combustíveis geram os óxidos de nitrogênio (NO_X), monóxido de carbono (CO) e compostos orgânicos, que são hidrocarbonetos (HC) não reagidos ou parcialmente reagidos oriundos do combustível admitido. Segundo Pulkrabek (1997), embora tenha ocorrido progressos significativos nos trabalhos de pesquisa e desenvolvimentos focados em redução das emissões de motores, o crescimento populacional e o aumento do número de automóveis reduzem esse avanço.

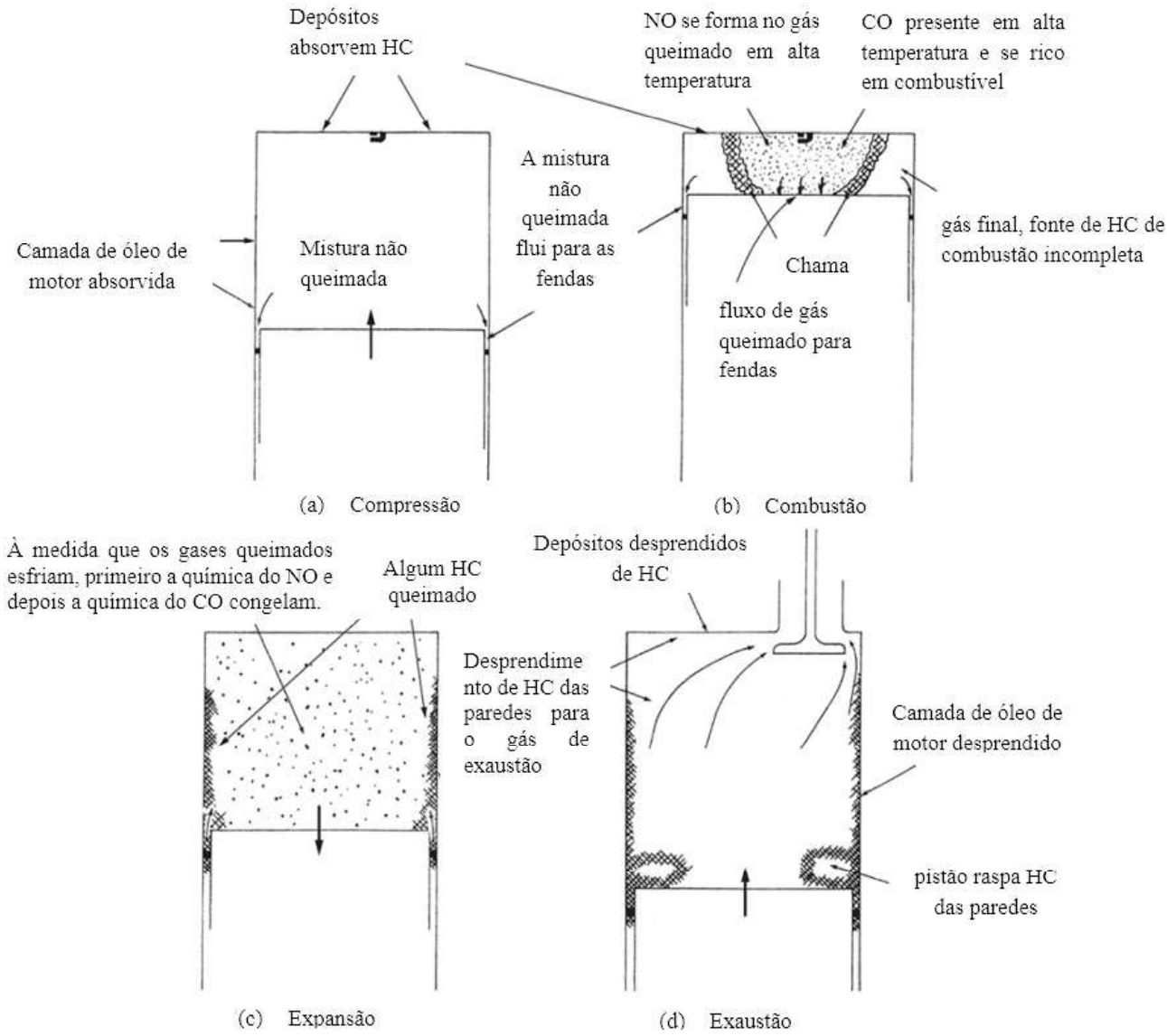
Na década de 1940 o impacto da utilização de automóveis e combustíveis fosseis pela indústria de forma geral, começaram a gerar impactos significativos no cotidiano da cidade de Los Angeles. Alguns anos depois, todas as grandes metrópoles já consideravam a poluição atmosférica como um problema ambiental grave. O principal impacto na cidade de Los Angeles foi um tipo de SMOG fotoquímico causado pela reação entre NO_X e hidrocarbonetos quando expostos a irradiação solar. A partir desses impactos, legislações começaram a ser desenvolvidas para controlar e mitigar o problema (Pulkrabek, 1997).

Glassman (2008) afirmar que existem dois tipos de poluentes: os poluentes primários, que são emitidos diretamente na atmosfera, e os secundários, formados por meio de reações químicas entre os poluentes primários. Segundo Heywood (2019), para alguns poluentes as reações de formação e destruição estão diretamente ligadas ao processo primário de combustão do combustível, como ocorre com o CO, HC e material particulado (poluentes primários). Já para os óxidos de nitrogênio e de enxofre, as reações de formação e destruição não estão diretamente ligadas à combustão, embora ocorram em condições resultantes desse processo. Assim, os dois tipos de processos, primários e secundários, estão interligados.

Entre os principais poluentes gerados pelos motores de combustão interna, o monóxido de carbono (CO), produzido quando ocorre insuficiência de oxigênio para reagir com todo o carbono presente na mistura admitida, impedindo a formação de CO_2. Outra causa de emissão ocorre quando a mistura de ar-combustível não atinge homogeneização adequada, devido ao curto tempo de duração do ciclo. Nas faixas de altas temperaturas, mesmo com misturas pobres, ocorre a dissociação térmica, resultando na formação de CO. Durante o curso de expansão a temperatura dos gases diminui, e a oxidação do CO deixa de ocorrer.

Os hidrocarbonetos (HC) presente nos gases de escape possuem diversas origens. O aumento de pressão durante o processo de compressão e combustão força parte da mistura ar-combustível não queimada presentes no interior do cilindro para as fendas do pistão e o cilindro, ondo os gases são aprisionados. Nessas regiões, devido ao espaço reduzido, a propagação da chama não ocorre. Outra fonte importante é a camada de óleo lubrificante depositada nas paredes do cilindro, que impede a combustão primária de uma fração do combustível. Essa fração é expelida para o sistema de exaustão (Heywood, 2019). Todos os hidrocarbonetos, com exceção do metano (CH_4), reagem com gases atmosféricos formando SMOG. Os óxidos de nitrogênio (NO_X) estão associados a altas temperaturas (2000 ~ 3000K) que são alcançadas durante o processo de combustão e provoca a dissociação do N_2, normalmente estável, em nitrogênio monoatômico (N), é então associado ao oxigênio reativo. Quanto maior a temperatura do gás, maior será a taxa de formação de óxidos de nitrogênio (NO_X). Esse grupo de poluentes é composto majoritariamente por moléculas de óxido nítrico (NO) e uma fração menor de dióxido de nitrogênio (NO_2) e traços desprezíveis de outras combinações do nitrogênio e oxigênio (Pulkrabek, 1997). Conforme abordado por Glassman (2008), em motores a combustão interna de ignição por centelha, operando em regime de combustão homogênea, o produto principal do NO_X é o óxido nítrico e a formação do dióxido de nitrogênio é uma fração que pode ser negligenciada. Enquanto para os motores diesel essa proporção varia de 10 a 30% da composição do NO_X. O processo ao qual os poluentes são formados em um motor de ignição por centelha convencional é ilustrado na Figura 12:

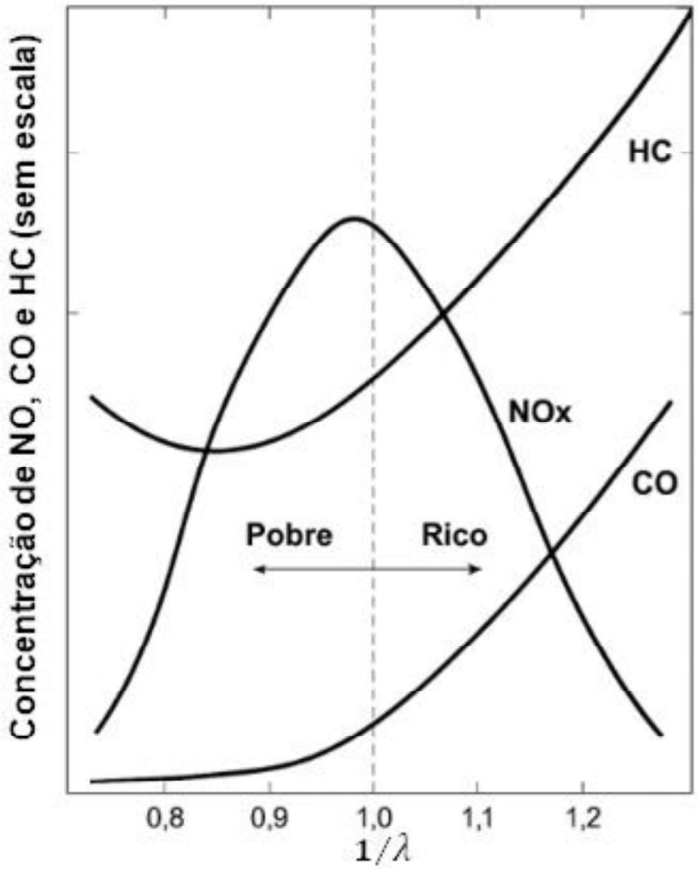
Figura 12 – Processo de formação dos poluentes durante o ciclo do motor



Adaptado, HEYWOOD, (2019).

A formação de NO_X está relacionada à alta temperatura dos gases alcançada na frente de chama, sendo mais significativa em temperaturas entre 2000 e 3000K. No entanto, a temperatura mais elevada dos gases ocorre com Lambda (λ) = 1, embora as maiores quantidades de NO_X formado ocorram com misturas ligeiramente pobres. á misturas mais ricas aumentam as emissões de CO e HC, comportamento que demonstra a importância da relação ar/combustível nas emissões de motores de combustão interna. O gráfico apresentado na Figura 13 demostra o comportamento da emissão de cada poluente em função do valor de λ.

Figura 13 – Relação da quantidade de poluentes emitidos com a relação ar/ combustível do motor.



Fonte: Adaptado. PULKRABEK (1997).

3.8.1 ÓXIDOS DE NITROGÊNIO

Os óxidos de nitrogênio (NO_x), são compostos principalmente por óxido nítrico (NO) e dióxido de nitrogênio (NO_2), desempenham um papel fundamental nos processos de poluição atmosférica, especialmente na formação de ozônio troposférico e do SMOG fotoquímico. Devido ao seu alto potencial de reatividade e aos impactos negativos sobre a saúde humana e o clima, as emissões de NO_x vêm sendo objeto de regulamentações ambientais cada vez mais rigorosas (Seinfeld, 2016).

Nas áreas urbanas, a principal fonte de NO_x é o setor de transporte, por meio da queima de combustíveis fósseis em motores de combustão interna. Uma vez emitidos para a atmosfera, esses poluentes participam de reações fotoquímicas com compostos orgânicos voláteis (COVs), formando ozônio (O_3) na baixa troposfera, um poluente secundário que

causa irritações respiratórias e contribui para a formação do SMOG (Jacob, 1999; Finlayson-Pitts e Pitts, 2000).

O mecanismo de formação do ozônio inicia-se com a fotólise do dióxido de nitrogênio (NO_2) pela radiação ultravioleta, produzindo óxido nítrico (NO) e oxigênio atômico (O). O oxigênio atômico então reage rapidamente com o oxigênio molecular (O_2), originando o ozônio troposférico, como demonstrado na Equação 16:

$$NO_2 + O_2 \overset{UV}{\leftrightarrow} NO + O_3 \tag{16}$$

Em um ambiente puramente inorgânico, o ozônio formado pode ser rapidamente consumido pela reação reversa com o NO, regenerando NO_2. No entanto, na presença de COVs, formam-se radicais peroxila (RO_2), os quais oxidam NO a NO_2 sem destruir o ozônio, resultando em um acúmulo líquido de O_3 (Seinfeld e Pandis, 2016; Jacob, 1999).

A intensidade desse ciclo depende da radiação solar, da concentração de NO_x e COVs, e das condições meteorológicas locais. Assim, episódios de SMOG fotoquímico são mais frequentes em dias ensolarados, secos e com baixa circulação atmosférica, características comuns em grandes centros urbanos no verão (Finlayson-Pitts e Pitts, 2000).

A formação dos óxidos de nitrogênio (NO_x) durante a combustão ocorre predominantemente a partir do nitrogênio molecular presente no ar atmosférico. Glassman (2008) destacam que essa é a principal fonte para a geração desses poluentes em processos combustivos. Entretanto, o nitrogênio presente no combustível pode também contribuir para a formação de NO_x, especialmente quando o combustível possui elevado teor nitrogenado, conforme ressaltado por Turns (2012). Diversas reações são capazes de formar NO durante e imediatamente após o processo de combustão, as Equações 17, 18 e 19 exemplificam algumas das reações mais comuns, embora não sejam as únicas rotas possíveis para a formação desses compostos. As condições específicas de temperatura, pressão e composição influenciam significativamente esses mecanismos (Melo, 2012).

$$O + N_2 \rightarrow NO + N \tag{17}$$

$$N + O_2 \rightarrow NO + O \quad (18)$$

$$N + OH \rightarrow NO + H \quad (19)$$

A formação de NO_2 pode ocorrer por várias reações que envolvem o NO, estão inclusos a Equação 20 e 21:

$$NO + H_2O \rightarrow NO_2 + H_2 \quad (20)$$

$$NO + O_2 \rightarrow NO_2 + O \quad (21)$$

Para o desenvolvimento do modelo de formação de NO_x proposto neste trabalho, foi adotado o mecanismo térmico de Zeldovich, reconhecido como a principal rota de geração de óxidos de nitrogênio em ambientes de alta temperatura, como nas zonas de combustão. Esse mecanismo, cujas reações elementares foram apresentadas nas Equações 17, 18 e 19, descreve a formação de óxido nítrico (NO) a partir do nitrogênio molecular presente no ar, reagindo com espécies altamente reativas, como o oxigênio atômico (O) e radical hidroxila (OH), sendo intensamente influenciado pela temperatura (Glassman, 2008).

A primeira reação do mecanismo, envolvendo N_2 e O, é considerada a etapa limitante, uma vez que apresenta elevada energia de ativação, o que restringe sua ocorrência a temperaturas superiores a aproximadamente 1800K (Turns, 2012). Para estimar a taxa de formação de NO a partir desse mecanismo, foi aplicada a metodologia proposta por Turns (2000), que incorpora as constantes cinéticas de avanço das reações envolvidas. No presente modelo, essas constantes são representadas por K_{1f} e K_{2f}, conforme definidas nas Equações 22 e 23, permitindo quantificar o avanço das reações em função das condições termodinâmicas do sistema.

$$O + N_2 \xrightarrow{K1f} NO + N \quad (22)$$

$$N + O_2 \xrightarrow{K2f} NO + O \quad (23)$$

A aplicação do mecanismo de Zeldovich, nesse contexto, permite avaliar isoladamente a contribuição térmica para a formação de NO_x, desconsiderando outras vias, como o *fuel-NO* ou o *prompt*-NO, que apresentam mecanismos cinéticos e dependências distintas (Bowman, 1975).

A formação de NO ocorre por meio de duas reações principais, conforme descrito nas Equações 22 e 23, sendo ambas consideradas no cálculo da taxa global de produção. Na primeira reação, o NO é formado a partir da interação entre N_2 e O, enquanto, na segunda, resulta da reação entre o radical N e O_2. A taxa de formação de NO pode, portanto, ser expressa pela soma das contribuições cinéticas dessas duas etapas na Equação 24:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{1f}[N_2][O] + k_{2f}[N][O_2] \tag{24}$$

Essa equação representa a taxa instantânea de produção de NO, considerando a influência das concentrações dos reagentes envolvidos e das constantes de taxa direta k_{1f} e k_{2f}, associadas às respectivas reações. Essa formulação é fundamental para a modelagem da formação de NO em sistemas de combustão de alta temperatura, nos quais o mecanismo térmico de Zeldovich é predominante.

O radical N atua como espécie intermediária no mecanismo térmico de Zeldovich. Ele é formado na primeira reação (Equação 22), a partir da interação entre O e N_2, e posteriormente consumido na segunda reação (Equação 23), ao reagir com O_2 para formar NO e regenerar o radical O. A variação da concentração de N ao longo do tempo pode ser descrita pela Equação 25:

$$\frac{d[N]}{dt} = k_{1f}[N_2][O] - k_{2f}[N][O_2] \tag{25}$$

Essa expressão evidencia o papel transitório do radical N, cuja concentração depende simultaneamente da taxa de sua formação e de seu consumo. O equilíbrio entre essas duas etapas é fundamental para a dinâmica da formação de NO em sistemas de combustão de alta temperatura.

No entanto, por se tratar de uma espécie intermediária altamente reativa, a concentração de N se mantém-se praticamente constante durante a maior parte do processo. Essa característica justifica a aplicação da hipótese do estado estacionário, uma aproximação comum em cinética química que considera que a taxa de formação de uma espécie

intermediária é aproximadamente igual à sua taxa de consumo. Matematicamente, essa suposição é expressa na Equação 26:

$$\frac{d[N]}{dt} \approx 0 \tag{26}$$

Ao aplicar essa condição à equação de taxa, obtém-se as Equações 27, 28 e 29:

$$k_{1f}[N_2][O] - k_{2f}[N][O_2] = 0 \tag{27}$$

$$k_{1f}[N_2][O] = k_{2f}[N][O_2] \tag{28}$$

$$[N] = \frac{k_{1f}[N_2][O]}{k_{2f}[O_2]} \tag{29}$$

A Equação 29 mostra que a concentração do radical N depende diretamente das concentrações de N_2 e O, e inversamente da concentração de O_2. Além disso, destaca o papel das constantes cinéticas k_{1f} e k_{2f}, que, por sua vez, são funções da temperatura, conforme descrito pela equação de Arrhenius.

A hipótese do estado estacionário é essencial para simplificar a análise cinética do mecanismo de Zeldovich, permitindo a obtenção de expressões analíticas para espécies de interesse, como o NO, sem a necessidade de resolver sistemas diferenciais complexos. Segundo Warnatz et al. (2006), essa abordagem é particularmente útil em sistemas de combustão, nos quais a dinâmica dos intermediários reativos ocorre em escalas de tempo muito curtas.

A Equação 29 pode, então, ser substituída na Equação 24, obtendo-se a Equação 30:

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{1f}[N_2][O] + k_{2f} \cdot \left(\frac{k_{1f}[N_2][O]}{k_{2f}[O_2]}\right) \cdot [O_2] \tag{30}$$

$$\frac{d[NO]}{dt} = k_{1f}[N_2][O] + k_{1f}[N_2][O] \tag{31}$$

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{1f}[N_2][O] \tag{32}$$

Portanto, ao considerar o estado estacionário do radical N, a taxa de formação de NO passa a depende exclusivamente da primeira reação, mas com o dobro da contribuição inicial. Esse resultado evidencia que a reação descrita pela Equação 22 é a etapa determinante do ritmo de formação de NO nas condições assumidas.

A espécie [O] (oxigênio atômico) também é altamente reativa e apresenta concentração muito baixa em sistemas de combustão, sendo difícil de ser determinada diretamente. Para contornar essa limitação, é possível expressar [O] a partir da reação de equilíbrio da dissociação do oxigênio molecular. A constante de equilíbrio para essa reação, em termos de pressão parcial, é dada pela Equação 33:

$$k_p = \frac{P_O^2}{P_{O_2} P^{\circ}} \tag{33}$$

Onde,

K_p = Constante de equilíbrio da reação de dissociação do oxigênio molecular (Pa ou atm);

P_{O2}= Pressão parcial de oxigênio molecular (O_2) no sistema (Pa ou atm);

P_O = Pressão parcial de oxigênio atômico (O) (Pa ou atm);

P^{o}= Pressão parcial padrão (Pa ou atm);

Para converter essa expressão para concentração molar, utiliza-se a equação dos gases ideais, conforme apresentado na Equação 34:

$$[C] = \frac{P}{RT} \tag{34}$$

Onde

[C]= Concentração molar da espécie gasosa (mol/L);

P= Pressão parcial da gasosa considerada (Pa ou atm);

R= Constante universal dos gases ideais (8,314 J/(mol·K));

T= Temperatura do gás (K);

Juntando as duas expressões e fazendo as devidas substituições:

$$k_p = \frac{P_O^2}{P_{O_2} P^{º}} \tag{35}$$

$$k_p = \frac{[O]^2 (RT)^2}{[O_2](RT) \cdot P^{º}} \tag{36}$$

$$k_p = \frac{[O]^2 (RT)^2}{[O_2] \cdot P^{º}} \tag{37}$$

$$[O] = \left[\frac{[O_2](k_p P^{º})}{(RT)}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{38}$$

Assim, fazendo as devidas substituições encontramos a equação global (Equação 39):

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 \cdot k_{1f} \left(\frac{K_p P^{O}}{R_u T}\right)^{\frac{1}{2}} [N_2][O_2]^{\frac{1}{2}} \tag{39}$$

Onde,

$[N_2]$: Concentração de N_2 (kmol/m^3);

$[O_2]$: Concentração de O_2 (kmol/m^3);

A constante de taxa k_{1f} depende da temperatura e segue a fórmula de Arrhenius, que é dada pela Equação 40.

$$k_{1f} = A \cdot e^{\frac{Ea}{RT}} \tag{40}$$

Onde,

k_{1f}: Constante de velocidade da reação;

A: Fator pré-exponencial ou constante de Arrhenius, que está relacionado à frequência de colisões entre as moléculas;

E_a: Energia de ativação da reação (geralmente em joules ou calorias por mol);

Os valores fornecidos para o fator pré-exponencial (A) e a energia de ativação (E_a) em Turns (2000) permitem o cálculo da constante de taxa (k_{1f}) para a reação de formação de NO.

Conforme apresentado na Equação 32, a determinação de k_{1f} é realizada dentro da faixa de temperatura variando de 2000 K a 5000 K, empregando a fórmula de Arrhenius. Esse procedimento possibilita a análise detalhada do comportamento da reação sob diferentes condições térmicas, sendo fundamental para compreender o impacto da temperatura na cinética da formação de óxidos de nitrogênio.

$$k_{1f} = 1{,}82 \cdot 10^{14} \cdot e^{\frac{-38{,}370}{T}} \tag{41}$$

Onde,

E_a = 38.370 J/mol);

A=1.82×10^{12} mol^{-1}. S^{-1};

A constante de equilíbrio K_P é determinada a partir da Equação 42:

$$K_p = \frac{(P_0)^2}{P_{O_2} \cdot P_0} = e^{\frac{-\Delta G_T^O}{R_u \cdot T}} \tag{42}$$

Onde

ΔG_T^O : Variação da energia livre de Gibbs;

Para calcular a constante de equilíbrio K_p, é necessário determinar a variação da energia livre de Gibbs padrão (ΔG_T^o) utilizando a Equação 43:

$$\Delta G_T^O = [2\Delta G_T^o(NO)] - [\Delta G_T^o(N_2) + \Delta G_T^o(O_2)] \tag{43}$$

Substituindo os valores:

$$\Delta G_T^O = [2 \cdot 86{,}203] \cdot [1 \cdot 0] \tag{44}$$

$$\Delta G_T^o = 176{,}406 \frac{kJ}{kmol} \tag{45}$$

A variação da energia livre de Gibbs é considerada na cinética química como uma função termodinâmica importante para avaliar a espontaneidade e o equilíbrio químico das reações envolvidas no processo de combustão. Reações que apresentam uma variação de energia livre de Gibbs negativa são espontâneas; quando a variação é nula, ocorre equilíbrio químico; e reações com variação positiva são não espontâneas, conforme apresentado na Tabela 3:

Tabela 3: Comportamento da reação baseado na variação da energia livre de Gibbs.

$\Delta G_T^o < 0$	Reação espontânea
$\Delta G_T^o = 0$	Equilíbrio químico
$\Delta G_T^o > 0$	Reação não espontânea

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Portanto, podemos substituir a variação da energia de Gibbs na Equação 42 e obter a Equação 46:

$$k_P P^o = e^{\left(\frac{-176,406}{8315 \cdot T}\right)} \tag{46}$$

Com isso, ao retornar à Equação 31 e realizar as devidas substituições, obtém-se a expressão da taxa de formação de NO, em kmol/m³·s conforme apresentado na Equação 47 e 48:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 \cdot k_{1f} \left(\frac{K_p P^o}{R_u T}\right)^{\frac{1}{2}} [N_2][O_2]^{\frac{1}{2}} \tag{47}$$

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 \cdot (1{,}82 \cdot 10^{14} \cdot e^{\frac{-38,370}{T}}) \left(\frac{e^{\left(\frac{-176,406}{8315 \cdot T}\right)}}{R_u T}\right)^{\frac{1}{2}} [N_2][O_2]^{\frac{1}{2}} \tag{48}$$

Para obter resultado em ppm, deve-se calcular a Equação 49:

$$ppm = \left(\frac{C \cdot 10^3 \cdot R \cdot T}{P}\right) \cdot 10^6 \tag{49}$$

Onde

C = Taxa de formação de NO (kmol/m³·s);

O fator 10^3 converte kmol para mol;

O fator 10^6 converte fração molar para ppm;

O estudo conduzido por Rao et al (2021), investigou a formação de NO_X em um motor de ignição por centelha operando com gás natural enriquecido com hidrogênio (HCNG) em diferentes taxas de recirculação dos gases de escape (EGR). O trabalho demonstra que a presença de hidrogênio no combustível eleva a velocidade de propagação da chama e a temperatura dos gases no interior da câmara de combustão, favorecendo a via térmica de

formação de NO_X, caracterizada pelas reações elementares de oxidação do nitrogênio molecular em altas temperaturas conforme descritas no mecanismo de Zeldovich. No entanto, a introdução controlada de EGR reduz o pico de temperatura e a concentração de oxigênio disponível, resultando em reduções significativas das emissões de NO_X. Os autores validaram que os resultados obtidos a partir das equações cinéticas do mecanismo térmico apresentam uma correlação de r=0,8353 com os dados experimentais, reforçando a premissa de que o mecanismo de Zeldovich representa o processo dominante de formação de NO_X.

Wang, Z. e Yang, X. elaboraram um trabalho de revisão publicado em 2024, que foram analisadas abordagens computacionais e experimentais aplicadas à combustão turbulenta, incluindo modelos baseados em CFD e redes cinéticas reduzidas. O artigo conclui que o mecanismo de Zeldovich continua sendo a metodologia mais utilizada e fisicamente consistente para previsões de NO_X quando há altas temperaturas (T > 1900 K), embora erros típicos de previsão variem entre 10 ~ 20%, dependendo da técnica numérica e da modelagem térmica adotada.

Ribeiro (2023) investigou as condições de operação que favorecem a formação de NO_X, analisando especificamente a contribuição do mecanismo de Zeldovich. Os resultados indicaram que a maior parte do NO_X é formada em regiões de alta temperatura da câmara de combustão, onde as moléculas de nitrogênio reagem com o oxigênio presente, confirmando a dependência direta entre temperatura e tempo de exposição das moléculas de N_2 e a produção de NO. Estratégias de mitigação, como controle da temperatura de combustão, otimização do fornecimento de ar e combustível e sistemas de pós-tratamento dos gases de escape, mostraram-se eficazes na redução das emissões. O estudo concluiu que o mecanismo térmico de Zeldovich é de fato o principal responsável pela formação de NO_X, sendo essencial para a modelagem precisa das emissões.

4 METODOLOGIA

4.1 DADOS EXPERIMENTAIS

O modelo para determinação da concentração de NO foi aplicado e validado para um motor de 1.3L de capacidade volumétrica, 4 cilindros em linha, naturalmente aspirado abastecido com etanol do posto (E100), operando com mistura estequiométrica, denominado como motor 1. Os dados deste motor contemplam dados experimentais referente à concentração de óxido nítrico durante os ensaios, bem como parâmetros específicos de combustão, condições de admissão e operação do motor. Os resultados dos testes experimentais foram cedidos por uma empresa privada para o desenvolvimento do estudo. Foram utilizados 9 pontos operacionais, obtidos pela combinação de 3 cargas (3, 6 e 9 bar de PME) e 3 rotações do motor (2500, 3500 e 4500 rpm).

Devido as normas de confidencialidade e segredo de tecnologia adotadas pela empresa, os dados fornecidos do Motor 1 não contempla informações completas de combustão, representando uma limitação para o estudo. Para contornar está limitação, foi necessário utilizar outro motor, denominado Motor 2, para validação da metodologia numérica para a determinação da curva de pressão dos gases no interior do cilindro.

A etapa de determinação da pressão dos gases é crucial para o correto desenvolvimento do trabalho, pois pressão e temperatura dos gases são os principais parâmetros para a determinação da concentração de óxido nítrico, objetivo geral do trabalho. As reações químicas envolvidas na formação do NO dependem da temperatura dos gases no interior do cilindro. Como métodos experimentais para a medição direta da temperatura dos gases são complexos e não viáveis para este trabalho, foram utilizados modelos termodinâmicos baseados na curva de pressão dos gases no interior do cilindro. A validação experimental da metodologia numérica é, portanto, essencial para a confiabilidade dos resultados calculados pelo modelo, exigindo dados experimentais completos da combustão, o que justifica a utilização do Motor 2.

O Motor 2 é um motor FIAT 1.6L 16V, naturalmente aspirado, abastecido com gasolina comum (E25), utilizado por Moreira (2014) para desenvolver e caracterizar um sistema de ignição por lança chamas. Todos os testes experimentais foram conduzidos por Moreira no CTM (Centro do Tecnologia da Mobilidade) da UFMG e os resultados foram cedidos para o desenvolvimento deste trabalho. Os dados utilizados são da configuração *baseline*, anterior a instalação do lança chamas, e incluem medições de pressão dos gases no interior do cilindro,

temperatura (calculada através do modelo termodinâmico do INDICOM), condição de operação e dados geométricos do motor.

4.2 DADOS GERAIS DOS MOTORES

Os principais dados de cada motor são apresentados na Tabela 4 conforme fornecido pelos fabricantes:

Tabela 4 – Dados dos motores conforme dados dos fabricantes.

Dados	Motor 1	Motor 2
Posição:	Transversal	Transversal
Cilindrada:	1332 cm^3	1568 cm^3
Nº de cilindros:	4 em linha	4 em linha
Diâmetro x curso:	70 x 86,5 mm	80,5 x 78,4 mm
Biela:	120 mm	133 mm
Razão Volumétrica de compressão:	13,2:1	9,5:1
Potência Máxima (ABNT) /Regime:	78,70 kW/ 6.250 rpm	79,04 kW / 5.500 rpm
Torque Máximo (ABNT) / Regime:	134,35 Nm / 4.000 rpm	150,92 Nm / 4.500 rpm
Válvulas por cilindro:	4	4
Alimentação de combustível:	Indireta	Indireta
Razão Ar/Combustível (AFR)	8,69	12,88

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

4.3 PROPRIEDADES DOS GASES

Como referência para os cálculos, e citado anteriormente, é adotado as seguintes hipóteses:

- **Mistura não queimada (*unburned*):** Vapor de combustível + ar seco;
- **Mistura queimada (*burned*):** Produtos da combustão completa estequiométrica.

O AFR de cada motor é conhecido, e relaciona as massas admitidas de ar e combustível, neste estudo, considerou-se a conversão completa do combustível. Portanto, é possível calcular a concentração mássicas para cada um dos elementos da admissão com

uma relação matemática simples que permite obter a proporcionalidade de cada substância através do AFR. Considerando que o produto da combustão é CO_2, N_2 e H_2O, os dados de concentração mássicas para a zona queimada podem ser obtidos através dos valores de massas obtidas pelos cálculos estequiométricos da Equações 5 e 6. As propriedades encontradas para cada espécie química são apresentadas na Tabela 5:

Tabela 5 – Concentrações mássicas das espécies químicas.

Composição mássica Motor 1		
Unburned	**Ar seco**	89,68%
	E100	10,32%
Burned	**H_2O**	11,77%
	CO_2	19,17%
	N_2	69,06%
Composição mássica Motor 2		
Unburned	**Ar seco**	93,08%
	E25	6,92%
Burned	**H_2O**	9,06%
	CO_2	19,18%
	N_2	71,76%

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Para obter resultados mais próximos dos dados experimentais, é essencial que as propriedades dos gases nas duas zonas do modelo sejam calculadas de forma a refletir com maior fidelidade o comportamento real durante a operação do motor. Nesse sentido, a calibração adequada do modelo depende do cálculo preciso de propriedades fundamentais, tais como: massa molar das substâncias envolvidas, composição dos gases queimados e não queimados nas reações químicas, calor específico a volume constante (C_v) e as constantes termodinâmicas associadas a cada gás.

A massa molar da substância é dada pela Equação 50:

$$Massa\ molar\ (\frac{g}{mol}) = N°\ de\ atomos\ X\ peso\ molar\ da\ substância\ (\frac{g}{mol}) \qquad (50)$$

A constante dos gases pode ser o calculada através da Equação 51, que relaciona a massa molar com a constante universal dos gases.

$$\frac{R}{mm}\ x\ V_m \qquad (51)$$

mm = Massa molar ($\frac{kg}{mol}$);

V_m= Volume mássico da substância (%)

Os dados de massa molar e constante do gás para as substâncias envolvidas no estudo estão na Tabela 6:

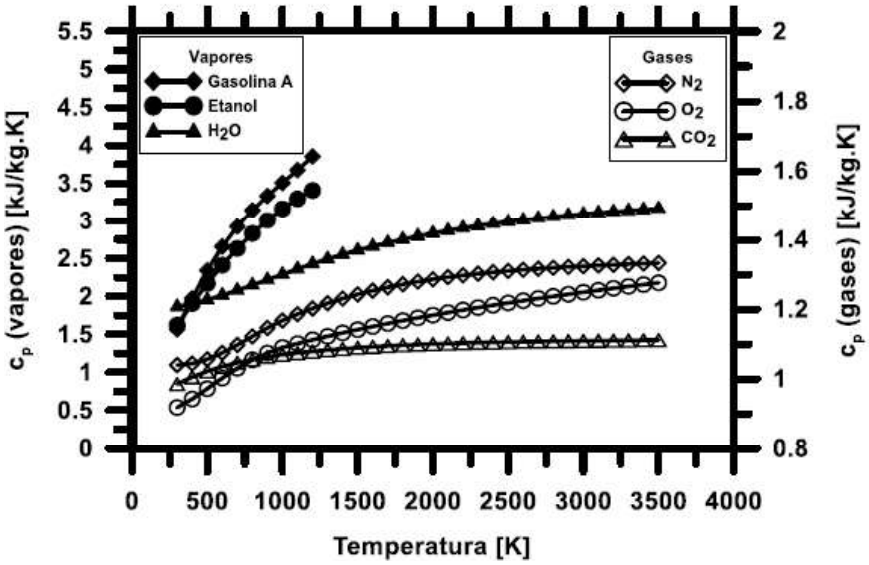
Tabela 6 – Propriedades das espécies químicas.

Substância	mm	R
Etanol (C_2H_5OH)	46,06	180,50
Isoctano (C_8H_{18})	114,23	72,70
Gasolina E25	97,19	99,53
Ar seco	28,93	287,06
Gás *Unburned* E100	30,70	276,28
Gás *Burned* E100	29,90	295,51
Gás *Unburned* E25	33,80	272,21
Gás *Burned* E25	29,97	272,21
CO_2	44,01	188,93
N_2	28,01	296,80
H_2O	18,01	461,53

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Heywood (2019) apresentou os valores encontrados de calor especifico a pressão constante (C_v) para diversas substâncias presentes na zona não queimada e queimada, através de dados obtidos nas tabelas de Jannaf (1971), conforme apresentado na Figura 14:

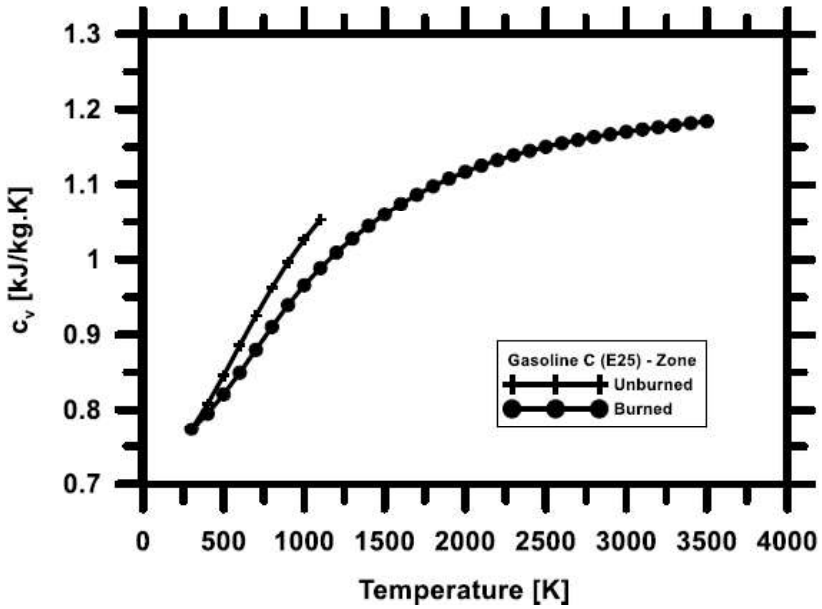
Figura 14 – Calor específico a pressão constante em função da temperatura para diversas substâncias.



Fonte: HEYWOOD (2019).

Teixeira (2014), determinou o calor específico a volume constante (C_v) para as zonas não queimada e queimada conforme apresentado na Figura 15, com base nos dados apresentados foi possível obter a equação que descreve a curva para C_v por temperatura e estimar os valores para os motores abordados.

Figura 15 – Calor especifico a volume constante em função da temperatura para as zonas de combustão.



Fonte: TEIXEIRA (2014).

4.4 TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR

A pressão dos gases no cilindro é um dos principais parâmetros analisados no processo de combustão. A variação de pressão no cilindro ocorre devido a alguns parâmetros importantes que devem ser observados para uma avaliação precisa do comportamento do motor. Entre os principais, destacam-se: a mudança do volume instantâneo, a combustão do combustível, transferência de calor para as paredes do cilindro, fluxo de fluido pelas fendas ou vazamento. Segundo Heywood (2019), os efeitos desses fenômenos podem ser incorporados à análise de pressão por meio da abordagem de liberação de calor baseada na primeira lei da termodinâmica. Essa metodologia considera o conteúdo da câmara de combustão como uma única zona e relaciona a variação de pressão diretamente à energia liberada pelo combustível durante o processo de combustão, apresentada pela Equação 52, a seguir:

$$\delta Q_{ch} = dU_s + \delta Q_{ht} + \delta W + \sum h_i dm_i \tag{52}$$

Onde,

δQ_{ch} = Energia química liberada pelo combustível;

dU_s = Variação na energia sensível de carga;

δQ_{ht} = Transferência de calor para as paredes;

δW = Trabalho realizado pelo pistão;

m_i = fluxo de massa para fora da fronteira do volume de controle.

h_i = Entalpia do gás.

O fenômeno do fluxo de gás pelo anel de vedação do sistema e o efeito de fluxo de entrada e saída de gases no volume de controle são negligenciados para possibilitar as manipulações necessárias para aproximar a taxa de liberação de calor, conforme realizado por Heywood (2019), assim, a Equação 52 pode ser reescrita conforme apresentado na Equação 53:

$$\frac{dQ_{ch}}{dt} - \frac{dQ_t}{dt} = p\frac{dV}{dt} + mC_v\frac{dT}{dt} \quad (53)$$

Sendo:

$\frac{dQ_t}{dt}$ = Transferência de calor para fora do sistema;

m = Massa dos gases dentro do sistema;

C_v = Calor específico a volume constante.

O processo varia em função da posição angular do virabrequim, sendo assim, é a unidade temporal considerada, o termo dθ foi aplicado a todos os elementos da Equação 53. Obtendo-se a Equação 54:

$$\frac{dQ_{ch}}{d\theta} - \frac{dQ_t}{d\theta} = p\frac{dV}{d\theta} + mC_v\frac{dT}{d\theta} \quad (54)$$

Considerando ainda os gases contidos dentro do cilindro como gases ideais e aplicando a primeira lei da termodinâmica, adota-se conforme apresentado nas Equações 55 e 56:

$$C_p = C_V + R \quad (55)$$

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad (56)$$

Baseado na Equação 54, a taxa de liberação de calor para motores de ignição por centelha é reescrita da forma apresentada na Equação 57:

$$\frac{dQ_{ch}}{d\theta} - \frac{dQ_t}{d\theta} = \left(\frac{\gamma}{\gamma-1}\right)p\frac{dV}{d\theta} + \left(\frac{1}{\gamma-1}\right)V\frac{dp}{d\theta} \quad (57)$$

O uso da Equação 57 permite determinar a pressão dos gases no interior do cilindro a partir do volume instantâneo e propriedades dos gases. O cálculo de transferência de calor para fora do sistema é complexo e não será desenvolvido devido ao nível de precisão que deseja alcançar e das limitações de dados sobre a geometria dos motores, embora tal perda não possa ser negligenciada. A liberação líquida de calor, representada pelo lado direito da Equação 57, é a liberação de energia química do combustível subtraído a quantidade de calor perdido para as paredes. Para a adequar a equação as condições disponíveis e garantir que os resultados fiquem coerentes com a realidade, foi adaptado um coeficiente de ajuste de

transferência calor ao termo que representa o calor perdido para a parede durante o processo, baseado na energia química do combustível. Portanto, define-se que que o termo pode ser substituído conforme apresentado na Equação 58:

$$\frac{dQ_t}{d\theta} = \frac{dQ_{ch}}{d\theta}.(1-\xi) \quad (58)$$

Onde,

ξ = Coeficiente de ajuste de transferência de calor.

Heywood (2019), indica que as perdas de calor durante a combustão são pequenas, mas podem representar até 15% da energia do combustível. Portanto esse valor será adotado como referência neste trabalho. A Tabela 7 apresenta os coeficientes utilizados para cada condição de operação:

Tabela 7 – Coeficiente de ajuste de transferência de calor estimados para cada condição de operação.

MOTOR 1		
ROTAÇÃO [rpm]	**PME [bar]**	**ξ [-]**
4500	3,00	0,87
4500	6,00	0,93
4500	9,00	1,00
3500	3,00	0,90
3500	6,00	0,90
3500	9,00	0,98
2500	3,00	0,87
2500	6,00	0,85
2500	9,00	0,95
MOTOR 2		
4500	20% torque	0,91
4500	50% torque	0,95

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

4.5 GRADIENTE DE TEMPERATURA

A concentração de NO emitido em motores a combustão interna apresenta uma dependência exponencial da temperatura. Por esse motivo, a determinação da temperatura necessidade de uma metodologia eficaz. Para tal, foi aplicada a modelagem híbrida que foi utilizada por Teixeira (2015) no desenvolvimento de modelo matemático para diagnostico da combustão em tempo real, que apresentou resultados coerentes com os dados experimentais. A modelagem híbrida apresenta hipóteses similares ao modelo de quasi-dimensional de duas zonas, implementando uma metodologia para o cálculo da temperatura baseado na fração de massa queimada e não queimada, temperatura média dos gases e nas propriedades químicas destes.

A temperatura da zona não queimada pode ser determinada através da Equação 59, adota-se a suposição de que o processo de compressão e expansão é politrópica tornando a equação dependente da pressão e do número politrópico, calculado para cada incremento do ângulo do virabrequim:

$$T_{ub} = T_m^{i=\theta_{ref}} . (\frac{P}{P_{ref}})^{\frac{n-1}{n}} \tag{59}$$

Através da equação dos gases ideais obtém-se a temperatura média para a zona não queimada, determinada pela Equação 60. Adota-se como referência 30º do ângulo do virabrequim antes do início da combustão.

$$T_{mub}^{i=\theta_{ref}} = \frac{m.R_{ub}.T_{\theta_{ref}}}{\forall_{\theta_{ref}}} \tag{60}$$

A temperatura dos gases queimados é dada pela Equação 61 que é calculada com base na fração de massa queimada, determinada através da função de Wiebe de estágio único, da constante dos gases ideias calculadas para cada zona e das temperaturas média e *unburned* (T_{ub}).

$$T_b = \frac{T_{mb} - T_{ub}(1-X_b)\frac{R_{ub}}{R_m}}{X_b \frac{R_b}{R_m}} \tag{61}$$

A temperatura média dos gases queimadas também foi obtida através da equação dos gases ideias, no entanto, a temperatura e volume adotados para o cálculo foi do ponto de interação, conforme apresentado na Equação 62:

$$T_{mb}^{i} = \frac{m.R_{ub}.T_{\theta_i}}{\forall_{\theta_i}} \quad (62)$$

Existem mecanismos físicos e termodinâmicos envolvidos no ciclo Otto que contribuem para a redução da temperatura na zona não queimada e queimada, e essas perdas não podem ser negligenciadas. Entre elas destacam-se o processo politrópico na fase de expansão, troca de calor com as paredes e entre as misturas, a dissociação das espécies químicas e a diluição pelos gases residuais. Portanto, é necessário a aplicação de um coeficiente de perdas térmicas, que serão aplicados as Equações 59 e 61, assim as equações podem ser reescritas da seguinte forma:

$$T_{ub} = (T_m^{i=\theta_{ref}} . (\frac{P}{P_{ref}})^{\frac{n-1}{n}}) . \xi_{ub} \quad (63)$$

$$T_b = \left(\frac{T_{mb} - T_{ub}(1-X_b)\frac{R_{ub}}{R_m}}{X_b \frac{R_b}{R_m}}\right) . \xi_b \quad (64)$$

A Tabela 8 apresenta os coeficientes de ajuste de perda térmica aplicados para cada condição dos motores:

Tabela 8 – coeficientes de ajuste de perda térmica para as zonas da Câmara de Combustão estimados para cada condição de operação.

MOTOR 1			
ROTAÇÃO [rpm]	**PME [bar]**	**ξ_{ub} [-]**	**ξ_b [-]**
4500	3,00	0,95	0,95
4500	6,00	0,94	0,89
4500	9,00	0,92	0,83
3500	3,00	0,95	0,90
3500	6,00	0,92	0,87
3500	9,00	0,85	0,82
2500	3,00	0,95	0,95
2500	6,00	0,95	0,93
2500	9,00	0,85	0,84
MOTOR 2			
4500	20% torque	0,95	0,92
4500	50% torque	0,95	0,94

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

4.6 CONCENTRAÇÃO DE ÓXIDO NÍTRICO (NO)

As emissões de óxidos de nitrogênio (NO_x) provenientes de processos de combustão são compostas predominantemente por monóxido de nitrogênio (NO). De acordo com a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos – EPA (2023), aproximadamente 90 a 95% do NO_x é emitido na forma de NO, enquanto apenas 5 a 10% correspondem ao dióxido de nitrogênio (NO_2). Dessa forma, a emissão de NO_2 foram desconsideradas neste estudo, uma vez que seu impacto na composição final dos NO_x não é predominante para as condições analisadas.

A metodologia adotada neste trabalho considera que a taxa de formação de NO pode ser determinada por meio da Equação 32. Essa equação resulta da aplicação do mecanismo térmico de Zeldovich, considerando as constantes cinéticas das reações dominantes, a dependência com a temperatura e a concentração das espécies envolvidas.

4.7 INCERTEZA DE MEDIÇÃO

Segundo Moreira (2014), para todas as grandezas determinadas a incerteza de medição associadas foram calculadas. Os dados foram obtidos através da calibração do sistema de medição, do certificado de calibração fornecido pelo próprio fabricante ou dos manuais dos equipamentos.

Moreira (2014) que desenvolveu os testes experimentais do Motor 2 indica que para as grandezas medidas durante as provas a incerteza de medição foi determinada através da metodologia proposta por Albertazzi (2009). Os dados necessários para o cálculo foram obtidos da calibração do sistema de medição, do certificado de calibração fornecido pelo fabricante ou dos manuais dos equipamentos e as incertezas associadas estão em conformidade com a ABNT 1585, o mesmo procedimento foi adotado para o Motor 1.

5 RESULTADOS

Está seção apresenta os resultados obtidos por meio do modelo matemático interativo desenvolvido no Software SCILAB, comparando-os aos resultados experimentais de referência, com o objetivo de validar as metodologias propostas. O modelo contempla a função de Wiebe para estimar a taxa de queima de combustível, o modelo da taxa de liberação de energia para estimar a pressão dos gases no interior do cilindro e modelo quasi-dimensional híbrido para o cálculo das temperaturas e o mecanismo térmico de Zeldovich para estimar a concentração de NO produzido durante o ciclo do motor.

O processo de desenvolvimento foi dividido em duas etapas. Na primeira, realizou a validação do método proposto para obter a taxa de liberação de calor, a pressão e a temperatura dos gases no interior do cilindro. Essa etapa foi aplicada aos dois motores avaliados e validada experimentalmente com o motor HI-TORQUE (Motor 2), cujo dados de pressão e temperatura eram conhecidos. Após comprovado a baixa incerteza associada à metodologia, procedeu-se à segunda etapa, que consistiu na determinação da concentração de NO emitido e posterior comparação com os dados experimentais para o Motor 1.

5.1 CÁLCULO DA FRAÇÃO DE MASSA QUEIMADA

A fração de massa queimada está diretamente relacionada ao aumento de pressão dos gases no interior do cilindro, e uma boa calibração do parâmetro de forma da função de Wiebe é essencial para determinar adequadamente o processo combustão do combustível. Embora a função de Wiebe amplamente aplicada em análise de motores de ignição por centelha e ignição por compressão, a determinação do parâmetro “ω” a partir dos valores de referência de MBF10, MBF50 e MBF90 para caracterização da curva é uma metodologia pouco discutida na literatura. Nesta etapa, o objetivo consiste em ajustar o parâmetro de forma de modo que o modelo apresente tempos de queima compatíveis com os valores experimentais para cada fração de massa queimada. Os resultados obtidos para os diferentes pontos de operação analisados estão apresentados na Tabela 9.

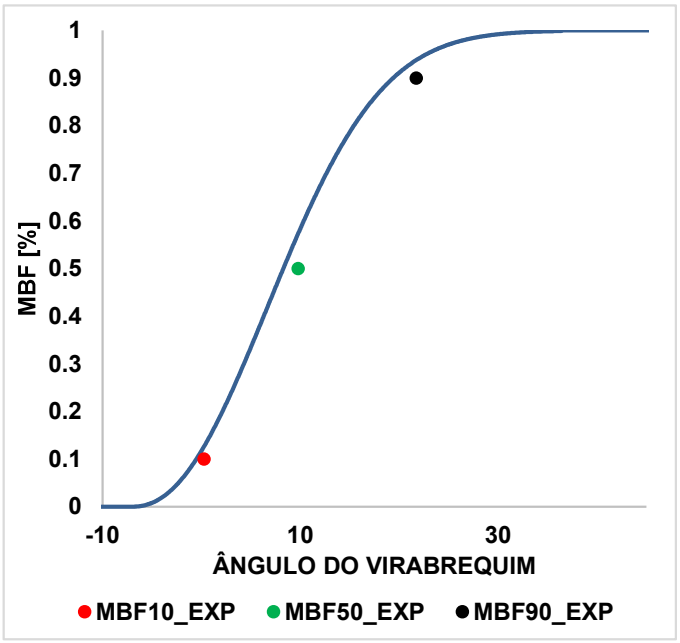
Tabela 9– Parâmetros de forma estimados para cada condição de operação do motor de cada motor.

ROTAÇÃO [rpm]	PME [bar]	PARAMETRO DE FORMA [-]
4500	3,00	1,24
4500	6,00	1,50
4500	9,00	1,44
3500	3,00	1,08
3500	6,00	1,24
3500	9,00	1,39
2500	3,00	0,93
2500	6,00	1,24
2500	9,00	1,05
ROTAÇÃO [rpm]	**TORQUE**	**PARAMETRO DE FORMA [-]**
4500	20%	1,28
4500	50%	0,86

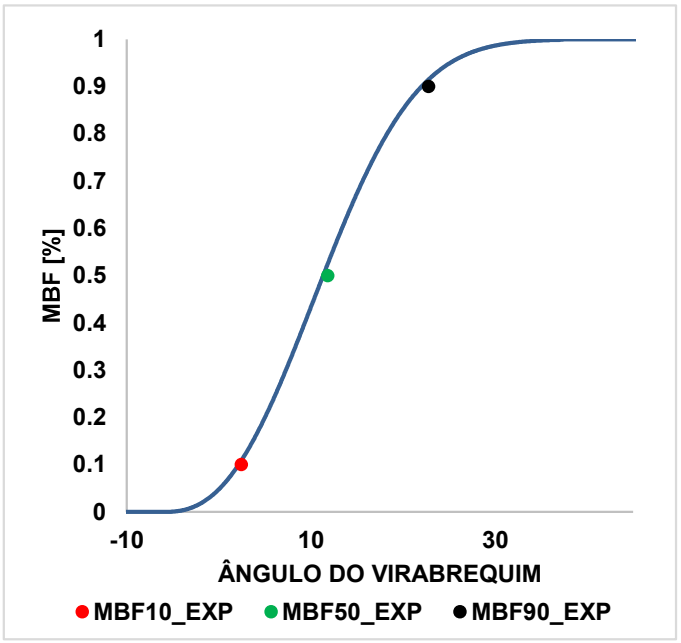
Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os resultados encontrados através da aplicação do modelo matemático proposto, referente a fração de queima de combustível para cada condição de operação do Motor 1 são apresentados nos gráficos da Figura 16:

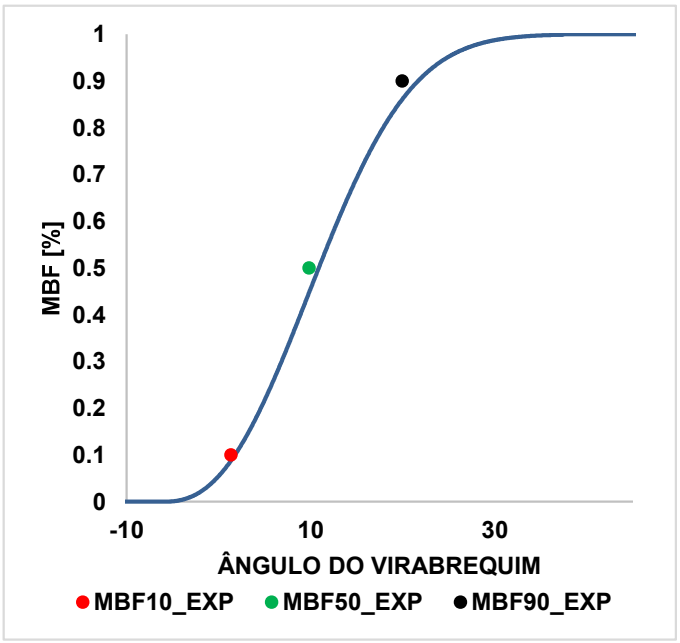
Figura 16 – Fração de massa queimada para as condições analisadas do Motor 1. (a): Condição de 4500RPM e 3 bar de PME; (b): Condição de 4500RPM e 6 bar de PME; (c): Condição de 4500RPM e 9 bar de PME; (d): Condição de 3500RPM e 3 bar de PME; (e): Condição de 3500RPM e 6 bar de PME; (f): Condição de 3500RPM e 9 bar de PME; (g): Condição de 2500RPM e 3 bar de PME; (h): Condição de 2500RPM e 6 bar de PME; (i): Condição de 2500RPM e 9 bar de PME.



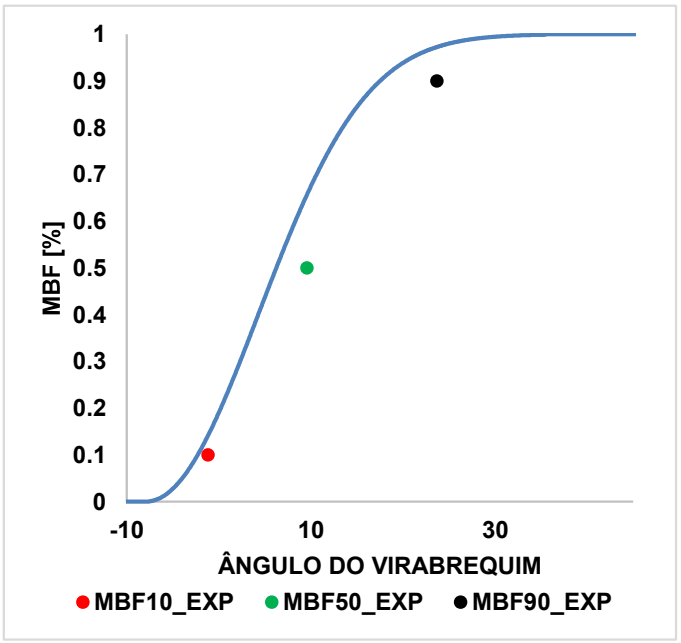
(a)



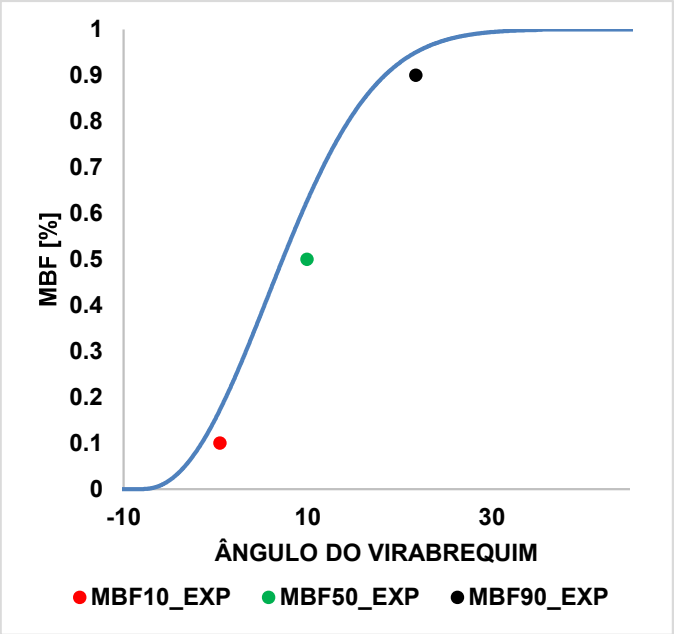
(b)



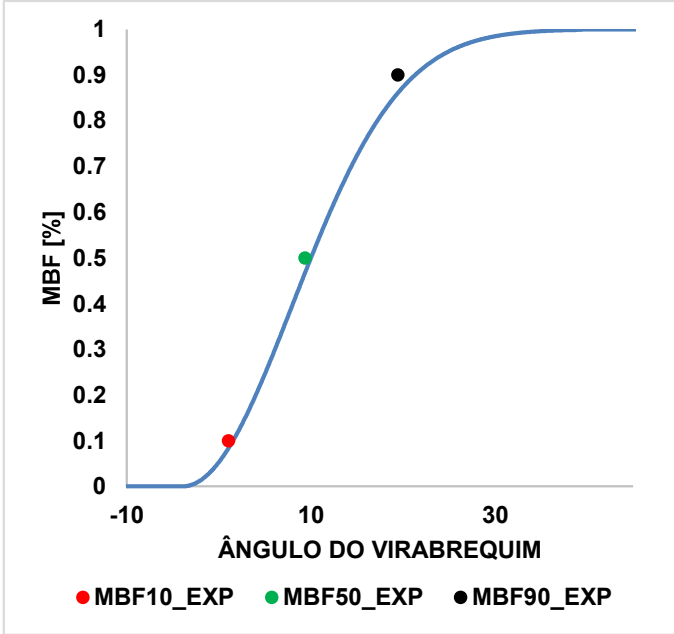
(c)



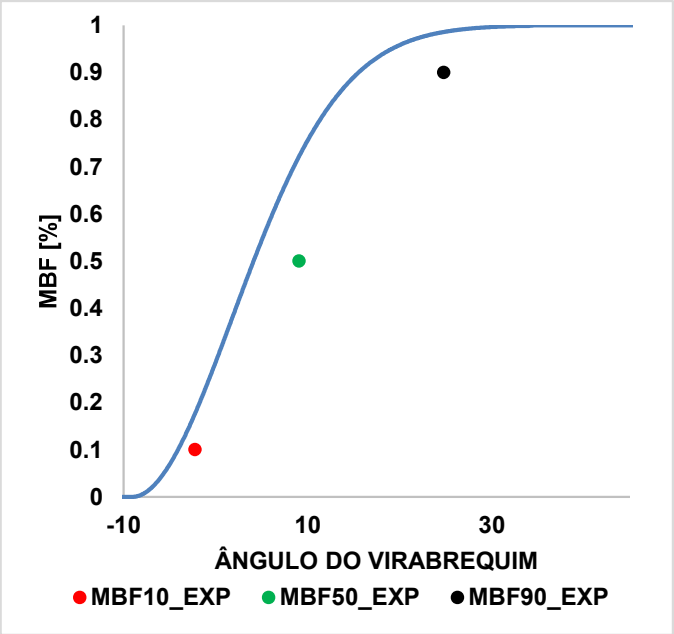
(d)


MBF [%]
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
-10
10
30
ÂNGULO DO VIRABREQUIM
MBF10_EXP
MBF50_EXP
MBF90_EXP

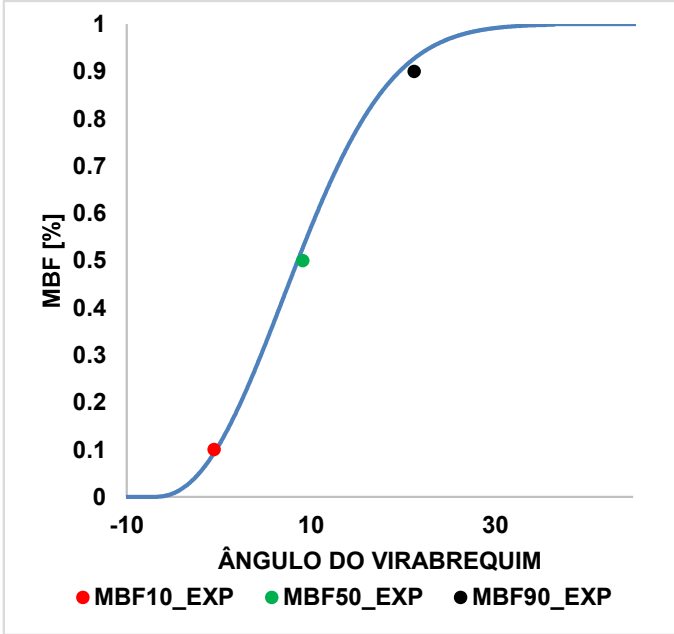
(e)


MBF [%]
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
-10
10
30
ÂNGULO DO VIRABREQUIM
MBF10_EXP
MBF50_EXP
MBF90_EXP

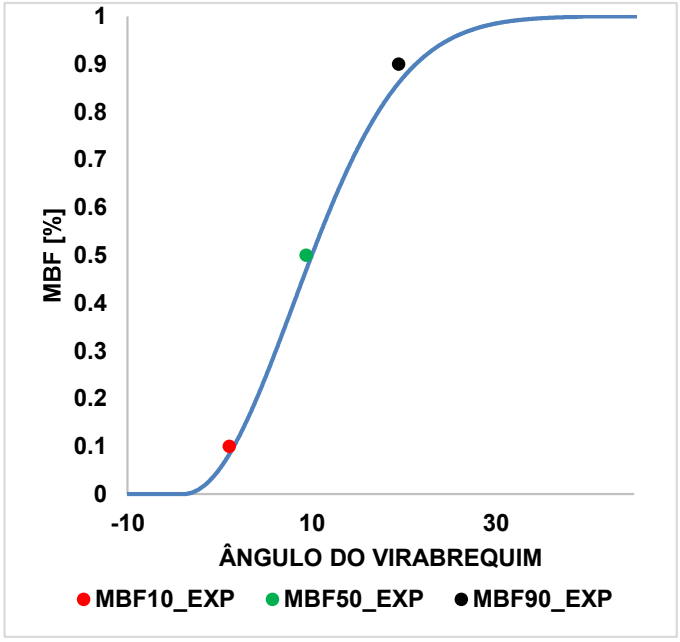
(f)


MBF [%]
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
-10
10
30
ÂNGULO DO VIRABREQUIM
MBF10_EXP
MBF50_EXP
MBF90_EXP

(g)


MBF [%]
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0
-10
10
30
ÂNGULO DO VIRABREQUIM
MBF10_EXP
MBF50_EXP
MBF90_EXP

(h)



(i)
Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

A Tabela 10 apresenta o erro associado aos resultados determinados com o algoritmo dos pontos de 10%, 50% e 90% de queima de combustível para cada condição estudada. Observa-se que os resultados referentes ao MBF10 apresentam maior dispersão, no entanto, a diferença em posição angular do virabrequim permanece entre 0,26° e 1,77°. Conforme destacado por Assis (2022), no período inicial da combustão há elevada variabilidade do processo de combustão e a queima de 10% do combustível admitido ocorre em um espaço de tempo reduzido. Estes fatores podem influenciar para a maior dispersão dos resultados para esta condição. Ainda assim, os erros observados mantêm-se dentro de limites definidos no trabalho para aplicações dos modelos de combustão (± 2° da posição angular do virabrequim experimental), indicando que o ajuste do parâmetro de forma é adequado para representar o processo físico analisado. Apenas duas condições apresentaram assimetria não condizente com os dados experimentais, correspondentes a 3500 rpm com 3 bar de PME e 2500 rpm com 3 bar de PME.

Tabela 10 – Erro associado a cada fração de massa queimada determinado com o modelo matemático proposto para o Motor 1.

		MBF10		MBF50		MBF90	
ROTAÇÃO [rpm]	**PME [bar]**	**Diferença [θ]**	**Diferença %**	**Diferença [θ]**	**Diferença %**	**Diferença [θ]**	**Diferença %**
4500	3,00	0,57	210,09	1,15	11,73	2,09	9,62
4500	6,00	0,26	10,40	0,47	3,99	0,71	3,11
4500	9,00	-0,46	-34,63	-1,07	-10,90	0,07	0,37
3500	3,00	0,99	-85,19	3,17	33,15	5,53	23,36
3500	6,00	0,71	154,47	1,31	13,24	1,79	8,25
3500	9,00	-0,50	-48,18	-1,23	-13,10	-1,96	-10,10
2500	3,00	1,77	-79,05	4,79	52,98	9,16	36,98
2500	6,00	0,73	-138,55	1,43	15,63	2,22	10,44
2500	9,00	-0,42	-34,15	-0,45	-4,66	-0,40	-1,90

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Outro parâmetro relevante é a duração da queima do combustível, analisado em três intervalos principais. Essa duração é determinada pelo tempo decorrido entre diferentes frações da queima acumulada, sendo considerados os períodos MBF10–50, MBF50–90 e MBF10–90. Os resultados obtidos para esses intervalos para cada ponto de operação do Motor 1, determinados através do algoritmo desenvolvido, são apresentados na Tabela 11.

Tabela 11 – Duração de queima obtida através do modelo matemático proposto para cada condição de operação para o Motor 1.

ROTAÇÃO [rpm]	**PME [bar]**	**MBF10-50**	**MBF50-90**	**MBF10-90**
4500	3,00	8,95	11,00	19,95
4500	6,00	9,15	10,70	19,85
4500	9,00	9,10	8,95	18,05
3500	3,00	8,55	11,75	20,30
3500	6,00	8,85	11,35	20,20
3500	9,00	9,05	10,80	19,85
2500	3,00	8,25	11,35	19,60
2500	6,00	8,95	11,30	20,25
2500	9,00	8,50	11,25	19,75

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os dados experimentais da duração de queima do combustível para o Motor 1 são apresentados na Tabela 12:

Tabela 12 – Duração de queima experimental para cada condição de operação do Motor 1.

ROTAÇÃO [rpm]	PME [bar]	MBF10-50	MBF50-90	MBF10-90
4500	3	9,53	11,94	21,47
4500	6	9,37	10,94	20,30
4500	9	8,49	10,09	18,59
3500	3	10,74	14,11	24,84
3500	6	9,45	11,83	21,29
3500	9	8,33	10,06	18,39
2500	3	11,27	15,72	26,99
2500	6	9,65	12,09	21,74
2500	9	8,47	11,30	19,77

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

A diferença percentual entre os resultados obtidos através do modelo e os dados experimental para a duração de queima do combustível para o Motor 1 são apresentados na Tabela 13:

Tabela 13 – Diferença percentual entre a duração de queima de combustível calculado através do modelo e dos dados medidos experimentalmente para o Motor 1.

ROTAÇÃO [rpm]	PME [bar]	MBF10-50 [%]	MBF50-90 [%]	MBF10-90 [%]
4500	3	6,06	7,89	7,08
4500	6	2,31	2,15	2,22
4500	9	-7,16	11,33	2,88
3500	3	20,35	16,71	18,29
3500	6	6,38	4,07	5,10
3500	9	-8,70	-7,31	-7,94
2500	3	26,81	27,79	27,38
2500	6	7,25	6,53	6,85
2500	9	-0,38	0,48	0,11

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

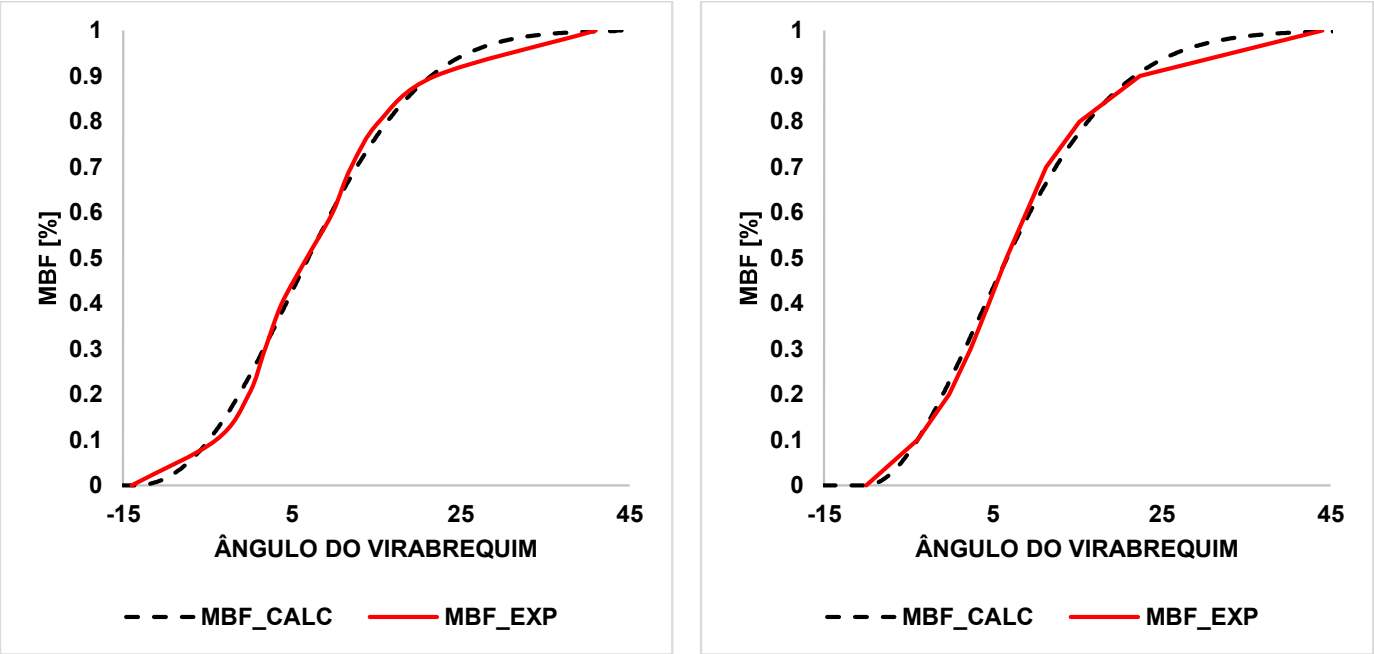
Os resultados obtidos através do modelo matemático proposto apresentam um erro médio dentro da expectativa (±10%) para a maioria das condições de operação analisados, visto que a determinação exata do tempo de queima de cada ponto é complexa e sujeito a incertezas experimentais. Ressalta-se que essa incerteza afeta diretamente a determinação da pressão dos gases no interior do cilindro, tornando o ajuste adequado da curva de combustão um fator determinante para a qualidade dos resultados.

Entretanto, para a condição de 3500 rpm com PME de 3 bar (Figura 16-d) e 2500rpm com PME de 3 bar (Figura 16-g), os resultados não foram compatíveis com dados experimentais, apresentando erro elevado e fora do limite considerado. Nessas situações, o processo de calibração do parâmetro de forma (ω) não conseguiu reproduzir adequadamente a assimetria da queima experimental, resultando na alteração das tendências observadas no perfil de pressão dos gases no interior do cilindro.

Observa-se ainda uma tendência de maior erro percentual associado à condição de 90% de combustão (MBF90). Tal comportamento decorre dos desvios presentes nos tempos de queima de MBF10 e MBF50, que influenciam diretamente a determinação da porção final da combustão, uma vez que o cálculo interativo torna os parâmetros mutuamente dependentes.

Na sequência, realizou-se a análise da fração mássica queimada para o Motor 2 a partir do algoritmo numérico proposto. Os resultados obtidos para cada condição de operação são apresentados nos gráficos da Figura 17:

Figura 17 – Fração de massa queimada para o Motor 2. (a) Condição de operação de 4500 rpm com 20% de torque; (b) Condição de operação de 4500 rpm com 50% de torque.

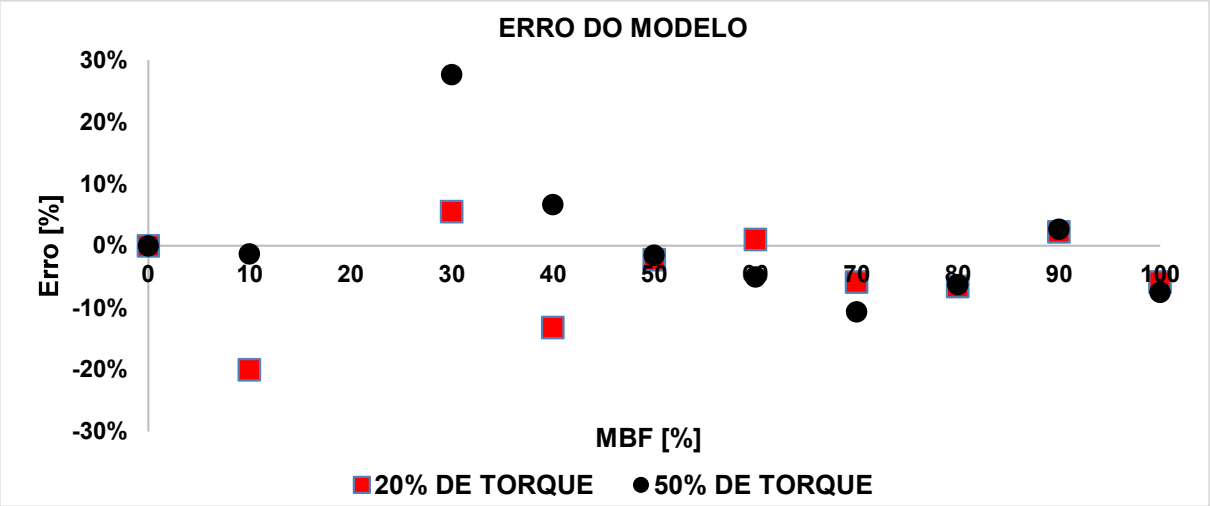


(a) (b)

FONTE: PRÓPRIO AUTOR (2025).

O erro associado entre os resultados obtidos pelo algoritmo e os dados experimentais para cada percentual de queima é apresentado na Figura 18. Observa-se que, para a condição de 20% de queima de combustível, o desvio percentual ultrapassa a escala definida no gráfico. Contudo, quando analisada a diferença em termos de posição angular do virabrequim, os valores são: 1,2° para 20% do torque máximo e 0,7° para 50% do torque máximo, indicando que, apesar do erro relativo elevado nesta região inicial da combustão, o impacto físico sobre a predição do processo permanece limitado.

Figura 18 – Erro associado a cada fração de massa queimada determinado com o modelo matemático proposto para o Motor 2.



Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os resultados de duração da queima encontrados a partir do algoritmo para cada condição de operação do Motor 2 são apresentados na Tabela 14:

Tabela 14 – Duração de queima obtida através do modelo matemático para cada condição de operação para o Motor 2.

ROTAÇÃO [rpm]	TORQUE [%]	MBF10-50 [%]	MBF50-90 [%]	MBF10-90 [%]
4500	20	11,7	14,6	26,3
4500	50	10,7	15,1	25,8

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os dados de duração de queima medidos experimentalmente e fornecidos por MOREIRA (2014) são apresentados na Tabela 15:

Tabela 15 – Duração de queima experimental para cada condição de operação do Motor 2.

ROTAÇÃO [rpm]	TORQUE [%]	MBF10-50 [%]	MBF50-90 [%]	MBF10-90 [%]
4500	20	11,75	14,50	26,25
4500	50	10,60	15,15	25,75

Fonte: ADAPTADO. MOREIRA (2014).

A diferença percentual entre os resultados obtidos através do algoritmo e os dados de duração experimental para o Motor 2 são apresentados na Tabela 16:

Tabela 16 – Diferença percentual entre a duração de queima de combustível do modelo e dos dados experimentais para o Motor 2.

ROTAÇÃO [rpm]	TORQUE [%]	MBF10-50 [%]	MBF50-90 [%]	MBF10-90 [%]
4500	20	0,42	0,69	-0,19
4500	50	-0,94	0,33	-0,19

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os resultados obtidos o Motor 2, apresentaram erro associado inferior a 1% para todas as condições de duração de queima do combustível analisadas, apresentando uma correlação com os dados experimentais de r=0,998.

5.2 CÁLCULO PRESSÃO DOS GASES

A pressão dos gases contidos no interior do cilindro foi determinada para cada condição de operação dos motores através da Equação 61, proposta por Heywood (2019) e adaptada para este estudo. Para o Motor 1, adotou-se como parâmetro de referência a pressão máxima dos gases (P_{MAX}), por ser uma variável experimentalmente medida e de alta relevância para a validação do modelo. A Tabela 17 apresenta os resultados obtidos pelo algoritmo, os valores experimentais correspondentes e o erro percentual associado para cada condição analisada.

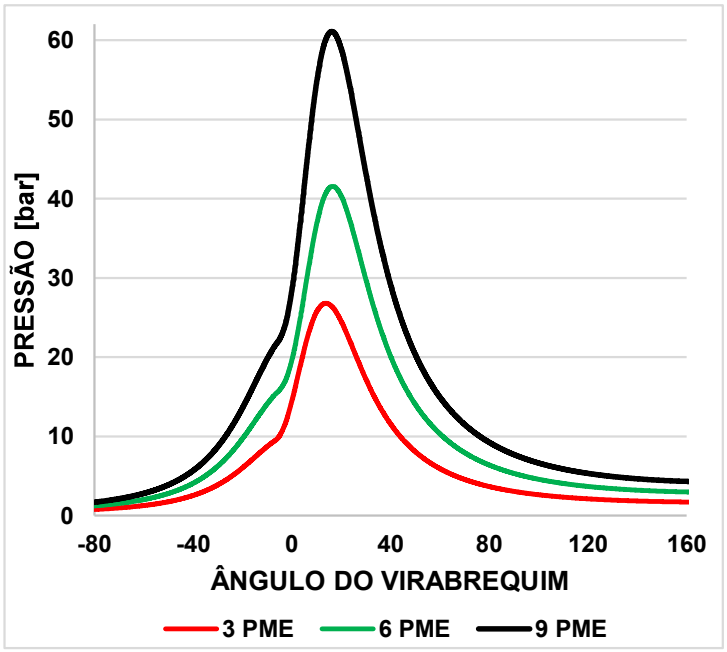
Tabela 17 – Pressão máxima dos gases no interior do cilindro para o Motor 1.

ROTAÇÃO [rpm]	PME [bar]	P_MAX CALCULADO [bar]	P_MAX EXPERIMENTAL [bar]	ERRO [%]
4500	3,00	26,54	26,807	-1,01
4500	6,00	41,57	41,350	0,54
4500	9,00	60,85	61,406	-0,91
3500	3,00	26,01	25,300	6,60
3500	6,00	41,85	41,260	1,41
3500	9,00	58,42	59,334	-1,57
2500	3,00	28,00	24,594	13,45
2500	6,00	40,98	40,906	0,22
2500	9,00	56,91	56,668	0,41

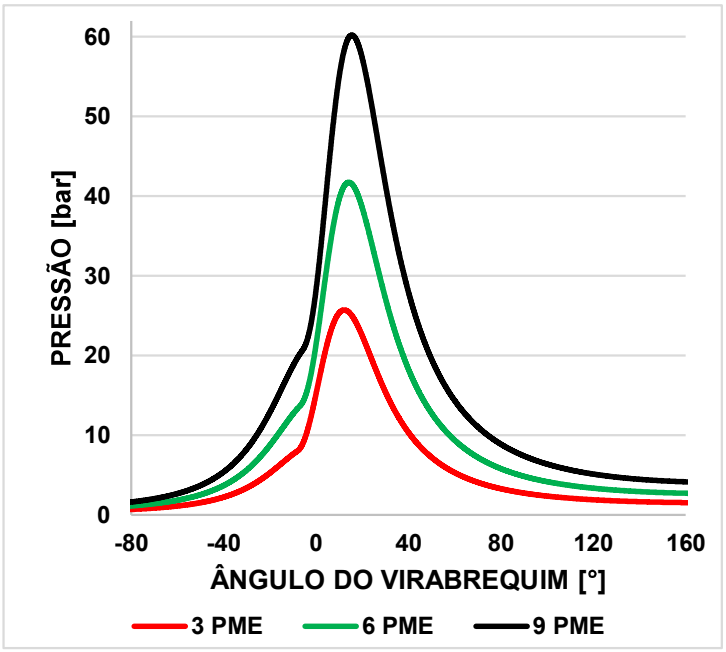
FONTE: PRÓPRIO AUTOR (2025).

As diferenças percentuais observadas para a condição de 3500 rpm com PME de 3 bar e para 2500 rpm com PME de 3 bar foram superiores à média das demais condições avaliadas. Esse comportamento está relacionado à assimetria do parâmetro de forma obtido durante o processo de determinação da taxa de queima de combustível, o que compromete a determinação da temperatura dos gases no interior do cilindro nessas condições específicas. Para os demais pontos de operação analisados, o erro percentual manteve-se inferior a ± 1,50%, este resultado é importante para a qualidade do gradiente de temperatura determinado, que está diretamente ligado a pressão dos gases. Os resultados referentes a cada condição operacional do Motor 1 são apresentados nos gráficos da Figura 19.

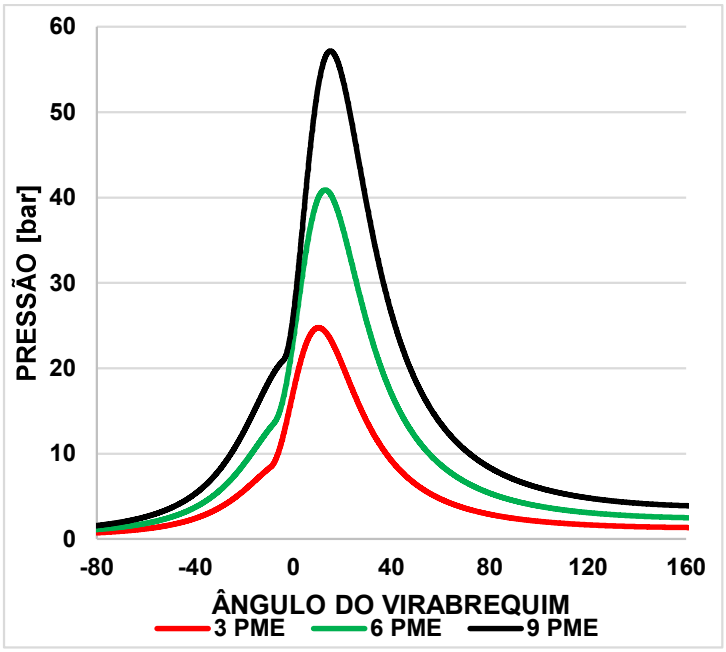
Figura 19 – Pressão dos gases no interior do cilindro – Motor 1. (a) Condição de operação de 4500 rpm, (b) Condição de operação de 3500 rpm, (c) Condição de operação de 2500 rpm.



(a)



(b)



(c)

FONTE: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os dados experimentais de pressão para o Motor 1 são limitados, e a curva de pressão dos gases no interior do cilindro não foi fornecida. Assim, a referência experimental utilizada foi a pressão máxima alcançada pelos gases no interior do cilindro durante o processo de combustão. Os dados obtidos pelo algoritmo apresentaram uma correlação de r=0,9997 com os dados experimentais, resultado significativo para a qualidade da determinação do gradiente de temperatura do motor.

A Tabela 18 apresenta os resultados de pressão máxima alcançadas pelos gases durante o processo de combustão obtidos pelo algoritmo, os resultados experimentais e o erro percentual entre os dados para o Motor 2.

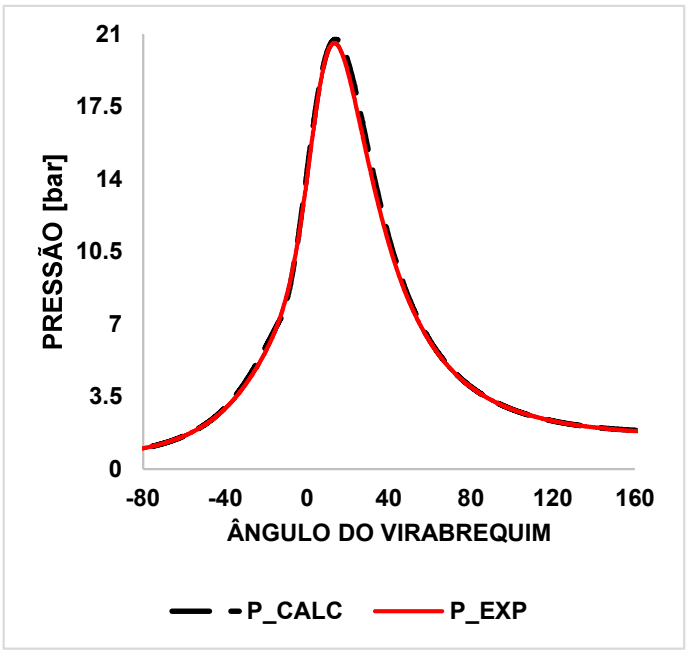
Tabela 18 – Pressão máxima dos gases no interior do cilindro para o Motor 2.

ROTAÇÃO [rpm]	PME [bar]	P_MAX CALCULADO [bar]	P_MAX EXPERIMENTAL [bar]	ERRO [%]
4500	3	20.751	20.564	0.900
4500	6	37.847	37.589	0.682

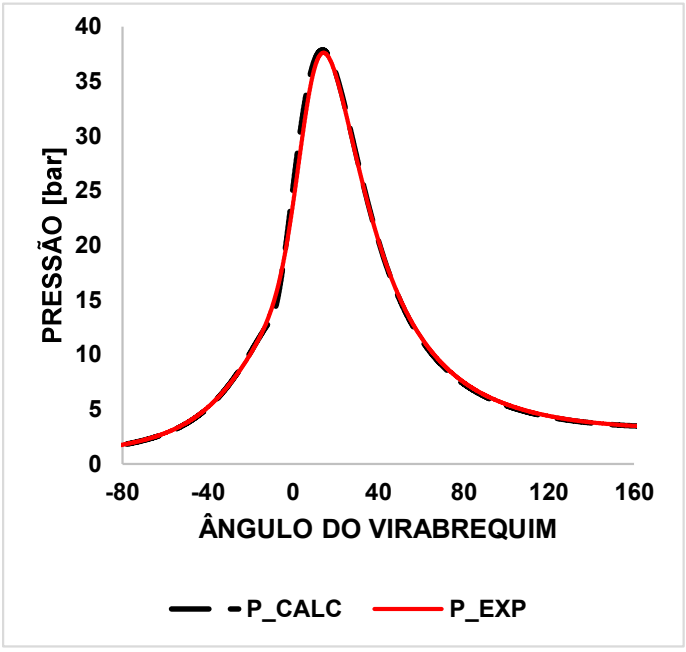
FONTE: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os gráficos da Figura 20 apresentam os resultados para cada condição de operação do Motor 2, juntamente com os dados experimentais.

Figura 20 – Pressão dos gases no interior do cilindro – Motor 2. (a) Condição de operação de 4500 rpm com 20% de torque; (b) Condição de operação de 4500 rpm com 50% de torque.



(a)



(b)

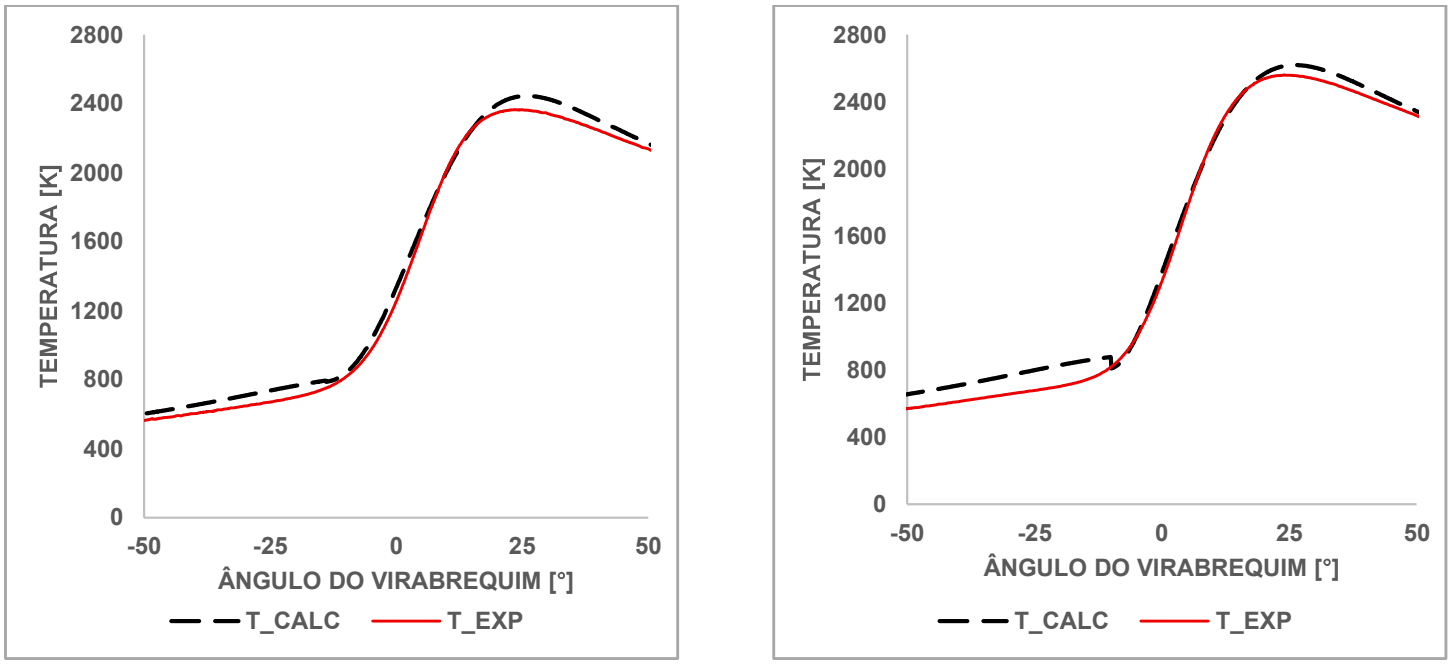
Autor: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os resultados obtidos através do algoritmo proposto obtiveram resultados ajustados aos dados experimentais. A análise da pressão máxima dos gases no interior do cilindro apresentou erro inferior a 1%. As curvas de pressão para as duas condições de operação analisadas para o Motor 2 apresentaram uma correlação elevada, adequada para a determinação do gradiente de temperatura do motor, sendo r=0,9998 para a condição de 20% de torque e r=0,9995 para a condição de 50% de torque.

5.3 DETERMINAÇÃO DO GRADIENTE DE TEMPERATURA

O Motor 2, que a curva de pressão foi determinada experimentalmente, contempla o gradiente de temperatura obtido por meio do modelo termodinâmico do Indimodul, software responsável pelo tratamento dos dados medidos durante os testes realizados no motor. Esses dados foram comparados aos dados obtidos com a aplicação do algoritmo proposto neste trabalho e são comparados nos gráficos apresentados na Figura 21.

Figura 21 – Gradiente de temperatura para o Motor 2. (a) Condição de operação de 4500 rpm com 20% de torque; (b) Condição de operação de 4500 rpm com 50% de torque.



(a) (b)

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

Os resultados obtidos pelo algoritmo apresentaram correlação elevada com os dados experimentais do Motor 2, sendo r=0,9993 para a condição de 20% de torque e r=0,9988 para a condição de 50% de torque. Esses resultados demostram capacidade do algoritmo em determinar com o gradiente de temperatura. Esta etapa foi executada somente para o Motor 2, os dados fornecidos para o Motor 1 não contempla tais informações. No entanto, o método demostrou capacidade para auxiliar na determinação da concentração de óxido nítrico.

5.4 DETERMINAÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE ÓXIDO NÍTRICO (NO)

A concentração de óxido nítrico, principal substância química que compõe o NO_X, foi determinado por meio do mecanismo térmico de Zeldovich. Esse mecanismo apresenta uma correlação exponencial com a temperatura, tornando os resultados muito sensíveis às variações nos dados de entrada do algoritmo. Após a calibração do modelo, foi possível calcular a concentração de NO emitido em ppm (partículas por milhão). Os resultados estão apresentados na Tabela 19. Está etapa do trabalho foi desenvolvida somente para o Motor 1, o qual o valor de concentração de NO para cada condição de operação foi determinada experimentalmente.

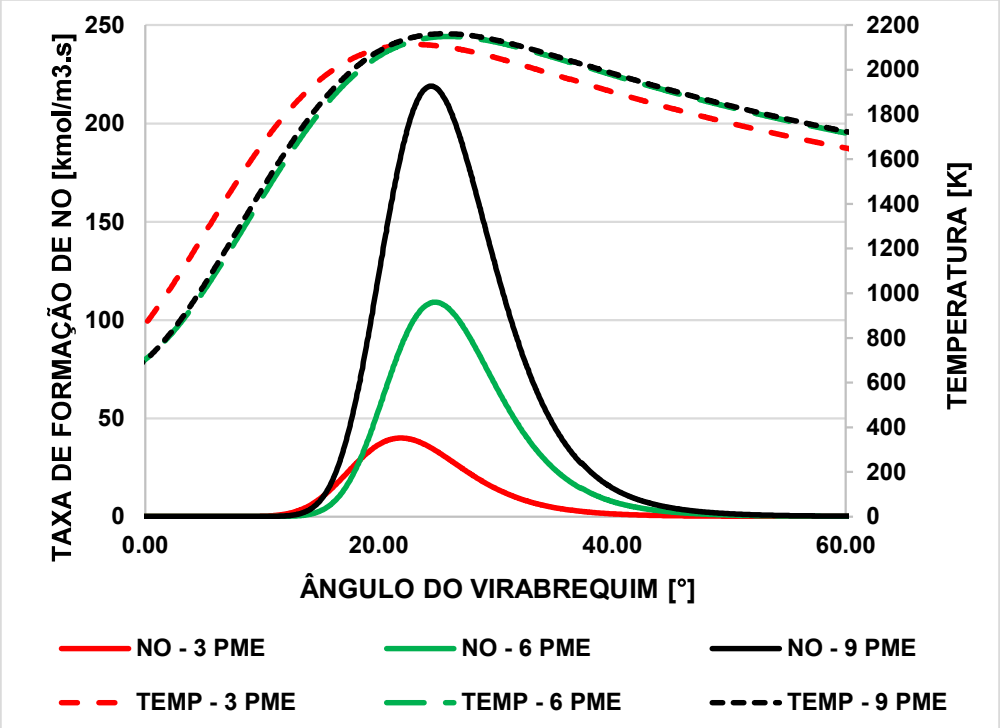
Tabela 19 – Concentração de óxido nítrico emitido – Motor 1.

ROTAÇÃO [rpm]	PME [bar]	NO CALCULADO [ppm]	NO EXPERIMENTAL [ppm]	DIFERENÇA [%]
4500	3,00	1116,86	1117,71	-0,08
4500	6,00	1668,96	1719,65	-3,04
4500	9,00	2529,14	2610,72	-3,23
3500	3,00	1233,84	572,10	53,56
3500	6,00	1626,98	1570,71	3,45
3500	9,00	2596,84	2551,07	1,76
2500	3,00	533,22	408,08	23,47
2500	6,00	1350,57	1376,42	-1,91
2500	9,00	2326,62	2205,81	5,19

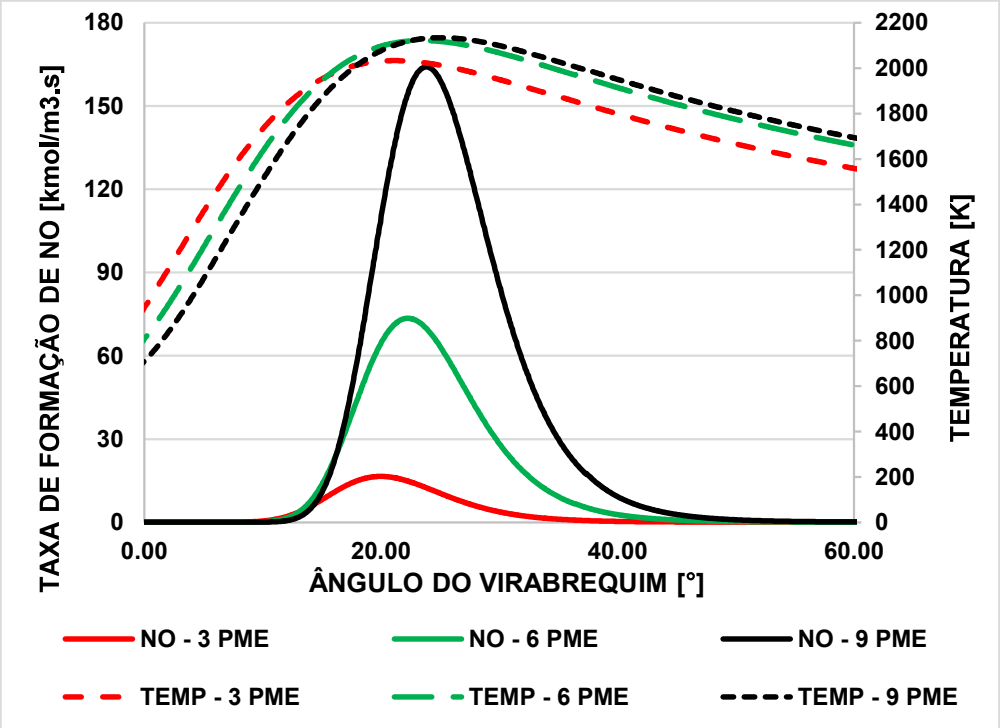
Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

A Figura 22 apresenta a taxa de formação instantânea do NO, comparado ao pico de temperatura. O comportamento encontrado está em linha com o esperado, ocorrendo formação de NO na zona de temperatura próxima a 2000K.

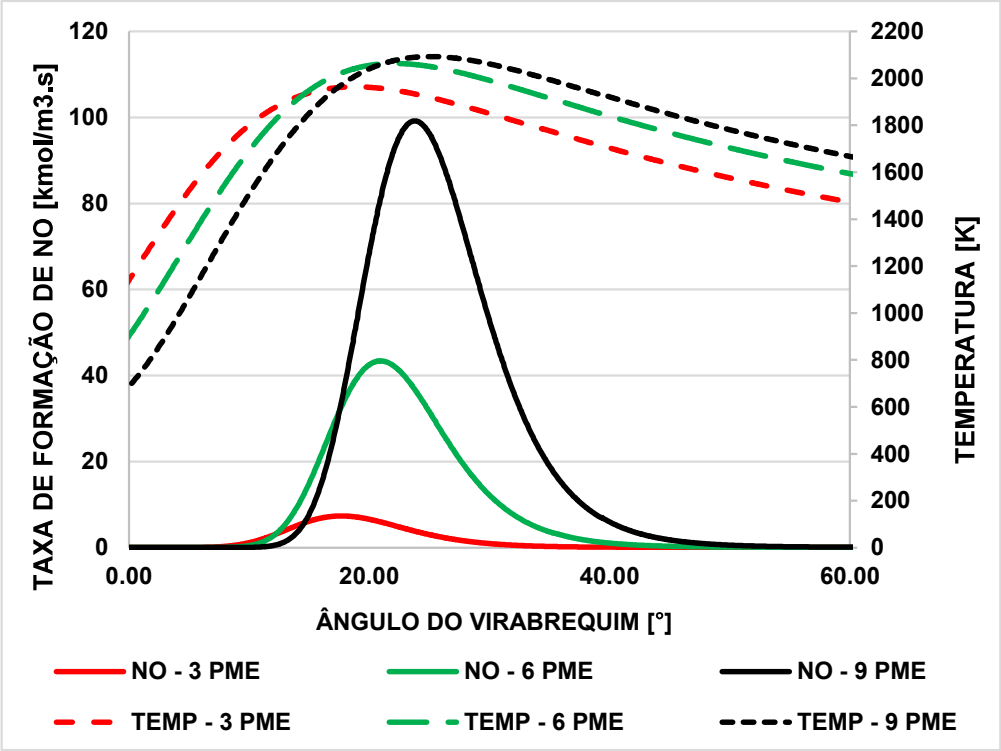
Figura 22 – Formação de NO x ângulo do virabrequim – Motor 1. (a) Condição de operação de 4500 rpm, (b) Condição de operação de 3500 rpm, (c) Condição de operação de 2500 rpm.



(a)



(b)



(c)

Fonte: PRÓPRIO AUTOR (2025).

O objetivo principal do algoritmo é determinar a concentração de óxido nítrico de motores de ignição por centelha. Neste trabalho utilizou-se o Motor 1 um como referência experimental. Os resultados obtidos apresentaram um erro médio de 8,79% e uma correlação de r=0,9630 em relação aos dados medidos experimentalmente. Analisando somente os 7 pontos de operação com assimetria da curva da fração de massa queimada esses números são de: erro médio de 0,31% e r=0,9930. Esses resultados demonstram a capacidade do algoritmo, a aplicabilidade do mecanismo térmico de Zeldovich e a capacidade da metodologia proposta para contornar a limitação de alguns dados experimentais. Os resultados apresentados na Figura 22 mostram ainda que o comportamento indicado pelo algoritmo está de acordo com o comportamento físico esperado para esse tipo de motor, alcançando uma maior taxa de formação de NO na região de maior temperatura dos gases durante a ciclo termodinâmico.

Os pontos que não apresentaram assimetria da curva de liberação de energia indicaram um erro superior à média dos demais pontos analisados, com 53,56% para a condição de 3500 rpm com 3 bar de PME e 23,46% para a condição de 2500 rpm e 3 bar de PME.

6 CONCLUSÃO

Foi utilizado um motor de combustão interna de ignição por centelha e naturalmente aspirado para avaliação da emissão de NO para 9 condições de operação diferentes. Complementarmente, um segundo motor para validação experimental das metodologias propostas para determinação da pressão e temperatura dos gases no interior da câmara de combustão. Os resultados obtidos foram satisfatórios para os objetivos estabelecidos ao início do trabalho, as principais conclusões são:

Sobre a metodologia aplicada:

- A função de Wiebe simples demostrou capacidade para fornecer resultados satisfatórios para as necessidades deste trabalho. Destaca-se, contudo, a necessidade de um ajuste criterioso do parâmetro de forma (ω), que afeta diretamente a assimétrica da curva da fração mássica queimada e, consequentemente, a determinação da pressão. O método proposto para determinação interativa do "ω", integrada ao código Scilab, apresentou erro médio inferior a 10% para 7 condições analisadas. Duas condições, entretanto, não apresentaram resultados satisfatórios (3500rpm com 3 bar de PME e 2500rpm com 3 bar de PME). A maior duração de combustão, que ocorre para as condições de rotação baixa, e o longo atraso de ignição das duas condições, que são altos em comparação com os demais pontos são hipóteses que pode justificar esse desvio. Essas particularidades não foram descritas com qualidade com a aplicação da função de Wiebe simples, assim não atendeu as expectativas, uma solução possível seria a aplicação da função de Wiebe dupla;
- O uso dos parâmetros de MBF10, MBF50 e MBF90 como referência experimental para a determinação da taxa de queima de combustível foi satisfatório para os motores analisados. Método que demonstrou ser uma alternativa para estudos com informações de combustão limitadas, similares ao desenvolvido neste trabalho;
- A utilização da pressão máxima dos gases na câmara de combustão (P_{MAX}), massa de ar admitido, massa de combustível injetado, condições de pressão e temperatura no fechamento de válvula de admissão foram utilizados como referência experimental para a determinação da curva de pressão em função

da posição angular do virabrequim, metodologia que possibilitou alcançar os objetivos propostos;

- O modelo quasi-dimensional híbrido permitiu determinar o gradiente de temperatura para ambos os motores, os dados obtidos para o Motor 2 estão ajustados aos dados obtidos através do modelo matemático do Indimodul. O método demonstrou capacidade para auxiliar na análise da temperatura dos gases contidos no interior da câmara de combustão. A qualidade da calibração deste modelo tem impacto significativo nos resultados de NO, uma vez que o poluente apresenta alta dependência da temperatura.
- O mecanismo térmico proposto por Zeldovich apresentou boa capacidade na determinação da concentração de óxido de nitrogênio (NO) para o motor analisado, embora o método seja complexo e necessita de dados de entrada com baixa incerteza.

Conclusão sobre os resultados obtidos:

- Os resultados obtidos referente a taxa de queima de combustível para o Motor 1 em cada condição de operação, foram satisfatórios para alcançar os objetivos desejados em 7 condições de operação. Contudo, apresentou um desvio indesejável para a condições de 3500 rpm com 3 bar de PME e 2500 rpm com 3 bar de PME. Para esses pontos o erro percentual médio para as durações analisadas foi de 19,49% e 28,81% respectivamente. Para os pontos satisfatórios a diferença encontrada entre os dados modelados e experimentais ficaram está entre 0,65% e 9%. Enquanto os resultados do Motor 2 apresentaram um erro associado entre 2,47% e 8,22%.
- Os resultados de pressão foram coerentes quando comparados aos dados experimentais de referência, apresentando desvios abaixo de 1,50% em relação a pressão máxima experimental para as condições de operação com o parâmetro de forma da função de Wiebe satisfatório. Para os dados que não tiveram o “ω” satisfatórios os desvios foram de 2,72% e 12,17%.
- As temperaturas obtidas através do algoritmo foram uteis para a determinação da concentração de NO com a aplicação do mecanismo térmico de Zeldovich. Os dados apresentaram um erro em relação aos dados experimentais entre -0,08% e 5,19%, ou em concentração, entre 0,85ppm e 120,81ppm. Resultados que demonstram a correlação dos resultados com os dados experimentais

através das metodologias aplicadas, com r=0,9942 que indica uma alta correlação.

Assim, de forma geral, concluiu-se que o algoritmo numérico desenvolvido demonstrou alta correlação nas etapas de determinação da fração de massa queimada, pressão e temperatura dos gases no interior do cilindro e concentração de óxido nítrico para os motores de combustão interna de ignição por centelha que foram analisados.

6.1 TRABALHOS FUTUROS

Oportunidades de melhoria e continuidade do algoritmo numérico proposto são:

- Analisar a capacidade da função de Wiebe duplo para determinação da taxa de queima de combustível com maior assimetria com os dados experimentais. Com isso, expressar os fenômenos físicos e químicos durante a combustão para adaptar as diversas estratégias de calibração que são aplicadas para cada condição de operação;
- Aplicação dos métodos propostos para motores com diferentes capacidades volumétricas, sobrealimentados e diferentes frações de combustíveis;
- Aplicação dos métodos propostos para diferentes condições de Lambda;
- Incorporar ao algoritmo mecanismo para determinação dos demais poluentes (CO, THC, MP).

REFERÊNCIAS

ALBERTAZZI, A., SOUZA, A. R. **“Fundamentos de metrologia científica e industrial”**. Barueri, SP. Manole, 2008

ANFAVEA – Associação Nacional dos Fabricantes de Veículos Automotores. *Anuário da Indústria Automobilística Brasileira 2025*. São Paulo: ANFAVEA, 2025. Disponível em: https://anfavea.com.br/site/wp-content/uploads/2025/04/DIGITAL-ANUARIO-2025altafinal_compressed-1.pdf. Acesso em: 29 abr. 2025.

ANP – Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. Resolução nº 907, de 18 de novembro de 2022. Estabelece as especificações dos produtos etanol anidro combustível e etanol hidratado combustível. *Diário Oficial da União: seção 1*, Brasília, DF, n. 221, p. 111-112, 21 nov. 2022. Disponível em: https://atosoficiais.com.br/anp/resolucao-n-907-2022-dispoe-sobre-as-especificacoes-do-etanol-combustivel-e-suas-regras-de-comercializacao-em-todo-o-territorio-nacional. Acesso em: 14 abr. 2025.

ANP – Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. *Painel Dinâmico do Mercado Brasileiro de Combustíveis Líquidos*. [S. l.]: ANP, [2025]. Disponível em: https://www.gov.br/anp/pt-br/centrais-de-conteudo/paineis-dinamicos-da-anp/paineis-dinamicos-do-abastecimento/painel-dinamico-do-mercado-brasileiro-de-combustiveis-liquidos. Acesso em: 01 jun. 2025.

ASSIS, M., **“Simulação Numérica 1d Do Desempenho De Um Motor Monocilíndrico Com Razão Volumétrica De Compressão Variável Operando Com E100”** Dissertação de Mestrado. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2022.

BRASIL. Ministério de Minas e Energia; EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. **“*Plano Decenal de Expansão de Energia 2034 – PDE 2034*.”** Rio de Janeiro: MME/EPE, 2024. Disponível em: http://www.epe.gov.br/pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/Plano-Decenal-de-Expansao-de-Energia. Acesso em: 27 Jan 2025.

BRUNETTI, F. **Motores de Combustão Interna - Vol. 1**. [s.l.] Editora Blucher, 2018.

BALDI, F., THEOTOKATOS, G., ANDERSSON, K., “**Development of a Combined mean value zero-dimensional model and application for a large marine four stroke diesel engine simulation”** Applied Energy, vol. 154, 2015, pp. 402-415. 2015.

BOIARCIUC A., FLOCH A., **"Evaluation of a 0D Phenomenological SI Combustion Model."** SAE Technical Papers, no. 910268, 2018.

BOWMAN, C. T. Control of combustion-generated nitrogen oxide emissions: technology driven by regulation. **Symposium (International) on Combustion**, v. 17, n. 1, p. 739–754, 1979.

CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. PCPV – Plano de Controle de Poluição Veicular 2023 – 2025. https://cetesb.sp.gov.br/veicular/wp-content/uploads/sites/6/2023/04/Plano-de-Controle-de-Prevencao-Veicular-2023-2025.pdf. Acesso em 09 dezembro 2024.

ÇENGEL, Y. A.; BOLES, M. A.; MEHMET KANOGLU. **Thermodynamics: an engineering approach**. New Delhi: Mcgraw-Hill, 2014.

Environmental Protection Agency (EPA). "***Overview of Nitrogen Dioxide (NO_2) Air Quality in the United States***." EPA, 2023. Disponível em: https://www.epa.gov/no2-pollution/overview-nitrogen-dioxide-no2-air-quality-united-states. Acesso em: 14 ago. 2025.

FAGUNDEZ, J., SARI, L., MARTINS S., SALAU, G., **"Comparative Analysis of Different heat Transfer Correlations in a Two-Zone Combustion Model Applied on a SI Engine Fueled With Wet Ethanol"** Applied Thermal Engineering, vol. 115, pp 22-32. 2016.

FINLAYSON-PITTS, B. J.; PITTS, J. N. **Chemistry of the Upper and Lower Atmosphere: Theory, Experiments, and Applications**. Academic Press, 2000.

Ganesan. **Internal Combustion Engines**. New York, N.Y.: Tata McGraw-Hill Education, 2004.

GIACOSA, D. Motores Endotermicos. 3aed. Madrid: Editorial Dossat S.A., 1986. 1986.

GLASSMAN, I.; YETTER, R. A. **Combustion 4 ed.** Amsterdam; Boston: Elsevier, 2008.

HEYWOOD, J. **Internal Combustion Engine Fundamentals 2E /**. New York, N.Y.: Mcgraw-Hill Education, 2019.

HEYWOOD, J. B., 1980, **"Engine combustion modeling - an overview"**, In: Combustion Modeling in Reciprocating Engines, Plenum Publishing Corporation, pp. 33-35, USA.

HUANG, X. et al. **“Increasing social resilience against climate change risks: a case of extreme climate affected countries**.” International Journal of Climate Change Strategies and Management, 11 jan. 2023.

JACOB, D. J. **Introduction to Atmospheric Chemistry**. Princeton University Press, 1999.

JAMES, E. H., **“Combustion modelling in spark ignition engines”**, Automotive Engineer, v. 9, n. 3, pp. 29-33. 1984.

MELO, T., **“Análise Experimental E Simulação Computacional De Um Motor Flex Operando Com Diferentes Misturas De Etanol Hidratado Na Gasolina.”** Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2012.

MOREIRA, T., “**Análise E Caracterização De Um Sistema De Ignição Por Lança Chamas Operando Com Carga Homogênea”** Tese de Doutorado. Universidade Federal de Minas Gerais, 2014.

MERKER, GÜNTER P, et al. **“Simulating Combustion – Simulation of Combustion and Pollutant Formation for Engine-Development.”** Springer Science & Business Media, 27 Dec. 2005.

NAGARAJA, S., RAVI, V., TEJA, R., NAYAK, V. et al., **"Performance and Emission Characteristics of a MPI Engine Fueled with Iso-Butanol/Gasoline Blends"** SAE Technical Paper 2014-01-1390, 2014.

SEINFELD, J. H.; PANDIS, S. N. **Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change**. 3rd ed. Wiley, 2016.

SOUZA, M. C. O.; CORAZZA, R. I. **“Do Protocolo Kyoto ao Acordo de Paris: uma análise das mudanças no regime climático global a partir do estudo da evolução de perfis de emissões de gases de efeito estufa”**. Desenvolvimento e Meio Ambiente, v. 42, 2017.

PENHA, P., **“Simulação Do Knock Em Motores De Ignição Por Centelha: Comparação E Validação Dos Modelos Para E27.”** Dissertação de Mestrado. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2022.

RIBEIRO, M., **“Produção de NOx em motores de combustão interna”**. Dissertação de Mestrado. Instituto Politécnico do Porto, Porto. 2023

Penha, P.; Magalhães, P.; “**Determinação Da Taxa De Liberação De Calor E Eficiência De Combustão De Um Típico Motor Diesel”.** Trabalho de conclusão do curso de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica De Minas Gerais, 2015

PEREIRA, F. A. S.; MOREIRA, T. A. A.; FILHO, F. A. R.; **"Evolução do controle de emissão de poluentes e os avanços tecnológicos necessários: uma abordagem histórica"**, p. 15-19. In: Anais do I Simpósio do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do CEFET-MG, SiPGEM. Belo Horizonte, 2023.

PURICELLI, S.; CASADEI, S.; Et al.; **“The effects of innovative blends of petrol with renewable fuels on the exhaust emissions of a GDI Euro 6d-TEMP car”.** Fuel 294 (2021): 120483.

PULKRABEK, Willard W. **Engineering fundamentals of the internal combustion engine. 1. ed.** Upper Saddle River, N.J.: Prentice-Hall, Inc., 1997.

RAMOS, J. A., 1989, “**Internal Combustion Engine Modeling”**, 1 ed., New York, Hemisphere Publishing Corporation.

RAO, A., GAO, H., et al. **“Study of Laminar Burning Speed and Calibration Coefficients of Quasi-Dimensional Combustion Model for Hydrogen Enriched Compressed Natural Gas Fueled Internal Combustion Engine along with Exhaust Gas Recirculation.”** Fuel, vol. 283, no. 119284,2021.

SCHIRMER, W. N.; RIBEIRO, C. B. **“Panorama Dos Combustíveis E Biocombustíveis No Brasil E As Emissões Gasosas Decorrentes Do Uso Da Gasolina/Etanol.”** BIOFIX Scientific Journal, v. 2, n. 2, p. 16. 2017.

SCHLICHTING, S., et al. **“Numerical Prediction of Research Octane Numbers via a Quasi-Dimensional Two-Zone Cylinder Model.”** Applications in Energy and Combustion Science, vol. 11, no. 100079. 2022.

SHIBATA, G., YAMAMOTO, K., SAITO M., INOUE, Y., et al. **“Optimization of Combustion Noise and Thermal Efficiency in Diesel Engines over a Wide Speed and Load Operational Range.”** International Journal of Engine Research, vol. 21, no. 4, pp. 698–712. 2019.

TEIXEIRA A. F., FILHO, F. A. R.; Et al.; **“Hybrid combustion model for engine analysis in real time”.** SAE Tech Pap 2015.

TURNS, S. R. “**An introduction to combustion: concepts and applications”**. Boston: Wcb/Mcgraw-Hill, 2000.

ZOU, F., ZENG, H. et al. **“Implementation and Parameter Analysis of the Knock Phenomenon of a Marine Dual-Fuel Engine Based on a Two-Zone Combustion Model.”** Processes, vol. 9, no. 4, p. 602. 2021.

WANG, Y.; HUANG, L.; Et al. **"High-resolution Modeling for Criteria Air Pollutants and the Associated Air Quality Index in a Metropolitan City."** Environment International 172.2023.

WANG, Z; Yang, X.; **“NOx Formation Mechanism and Emission Prediction in Turbulent Combustion: A Review”** Applied Sciences. 2024.

WARNATZ, J.; MASSAUX, C.; WILLIAMS, F. A. **Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation**. 4. ed. Berlin: Springer, 2006.

APÊNDICE A – CODIGO EM SCILAB

```
DADOS DE ENTRADA

R_universal=8.3145 //(j/mol.K) - Calculo da constante do gás


// PARAMETROS GEOMETRICOS DO MOTOR N4

B = 0.070; // Diâmetro do cilindro (m)

l = 0.120; // Comprimento da biela (m)

S=0.0865 //Curso do pistão

Tc=13.2 // Taxa de compressão

a_virabrequim = S/2; // Raio da manivela (m)

Ac = %pi * (B^2) / 4;// Área superficial do cilindro

Vd=Ac*S // Volume deslocado total

Vc = Vd/(Tc-1); // Volume da câmara de combustão (m³)

Vt=Vd+Vc // Volume total do cilindro


//PARAMETROS DE OPERAÇÃO DO MOTOR

PCI=26810000 //J/kg Considerando E100 (95% de etanol)(dados da tabela A-27 do livro Çengel)

dados_entrada=readxls('C:\Users\Avell\OneDrive\Dissertação\Base de dados\N4\MBF_N4.xls')//Acessando a tabela com os dados de operação do motor

n_abas=9

for p=1:n_abas //loop para armazenamento das condições de operação

   h=dados_entrada(p)

   param_entrada(:,p)=h(:,2)

   rotação(1,p)=param_entrada(1,p) // rotação do motor
```

```
   m_fuel(1,p)=((param_entrada(3,p)/60)/(rotação(1,p)/2))/4//Massa de combustível em kg/ciclo

   m_ar(1,p)=((param_entrada(4,p)/60)/((rotação(1,p)/2))/4)//Massa de ar seco em kg/ciclo

   residual(1,p)=param_entrada(19,p)

   m_entrada(1,p)=m_fuel(1,p)+m_ar(1,p)+0.000375*residual(1,p) //0.375g=massa de ar em 333cm3
a 40°C e 1013 mbar

   lambda(1,p)=param_entrada(5,p)

   AF(1,p)=param_entrada(6,p)*lambda(1,p) // Relação ar/combustível para o E100

   ai10(1,p)=param_entrada(7,p) //MBF10

   ai50(1,p)=param_entrada(8,p) //MBF50

   ai90(1,p)=param_entrada(9,p) //MBF90

   p_ref(1,p)=param_entrada(10,p) //Pressão inicial (fechamento de valvula de admissão)

   t_ref(1,p)=param_entrada(11,p) //Pressão inicial (fechamento de valvula de admissão)

   time_ref(1,p)=param_entrada(12,p) //Pressão inicial (fechamento de valvula de admissão)

   p_max_ref(1,p)=param_entrada(13,p)// Pressão máxima

   ef_combustao(1,p)=param_entrada(14,p)//Eficiência de combustão

   ef_compressao(1,p)=param_entrada(15,p)//Eficiência de compressão

   ef_expansao(1,p)=param_entrada(16,p)//Eficiência de expansão

   ca(1,p)=param_entrada(17,p)//Coeficiente de ajuste NO

   NO_ref(1,p)=param_entrada(18,p)

   t_m_ub(1,p)=param_entrada(20,p)

end


// Estequiometria da combustão


//PESO MOLAR DAS SUBSTANCIAS

C=12.011 //Peso molar do Carbono

H=1.008 //Peso molar do Hidrogênio
```

O=15.999 *//Peso molar do Oxigênio*

N=14.007 *// Peso molar do Nitrogênio*

//MASSA MOLAR DAS SUBSTÂNCIAS

mm_O2=O*2 *// Massa molar do Oxigênio*

mm_N2=N*2*// Massa molar do Nitrogênio*

mm=2*C+6*H+O *// Massa molar do E100*

mm_H2O=H*2+O*// Massa molar do Agua*

mm_CO2=C+O*2*// Massa molar do monoxido de carbono*

//CONCENTRAÇÃO VOLUMETRICA

y_N2_arseco=0.7905 *// concentração volumetrica do oxigênio no ar seco*

y_O2_arseco=0.2095*// concentração volumetrica do nitrogênio no ar seco*

Cv=1.246 *// kJ/kg.K*

Cp=1.427 *// kJ/kg.K*

Cv_arseco=0.717 *// kJ/kg.K*

Cp_arseco=1.004 *// kJ/kg.K*

Cv_H2O=1.410 *// kJ/kg.K*

Cp_H2O=1.872 *// kJ/kg.K*

Cv_CO2=0.653 *// kJ/kg.K*

Cp_CO2=0.842 *// kJ/kg.K*

Cv_N2=0.745 *// kJ/kg.K*

Cp_N2=1.042 *// kJ/kg.K*

//_____ CALCULO DAS PROPRIEDADES DOS GASES_____

// CONCENTRAÇÃO MÁSSICA

// Para converter a concentração volumetrica em concentração massica, precisa primeiro saber a relação molar, portanto, considerando que existe 1mol de oxigênio e faz uma regra de 3

//RELAÇÃO MOLAR DO AR SECO:

mol_O2_arseco=1 *// mol de oxigênio no ar seco*

mol_N2_arseco=y_N2_arseco/y_O2_arseco *// mol de nitrogênio no ar seco. Não precisa multiplicar pelo Mols do combustível porque não tem reação, tudo que entra, sai.*

// A concentração molar é a relação do numero de mols com a massa molar dividido pela massa total dos reagentes

x_O2_arseco=(mol_O2_arseco*mm_O2)/(mol_O2_arseco*mm_O2+mol_N2_arseco*mm_N2)*// concentração massica O2*

x_N2_arseco=(mol_N2_arseco*mm_N2)/(mol_O2_arseco*mm_O2+mol_N2_arseco*mm_N2)*// concentração massica N2*

mm_arseco=(x_O2_arseco*mm_O2)+(x_N2_arseco*mm_N2) *//Massa molar de ar seco*

//COMPOSIÇÃO MASSICA

for i=1:n_abas *//loop para armazenamento das composições massicas de cada condições de operação*

    %Ar(1,i)=AF(1,i)/(AF(1,i)+1)

    %fuel(1,i)=1/(AF(1,i)+1)

  end

//###################### ESTEQUIOMETRIA C8H18 (Octano) ####################################

*//Equação: C8H18 + y_N2_arseco*b*N2 + y_O2_arseco*b*O2 > Z*H2O + Y*N2 + WCO2*

Wg=8 *// CARBONO*

Zg=18/2*// HIDROGÊNIO*

bg=(Zg+Wg*2)/(2*y_O2_arseco)*//OXIGÊNIO*

Yg=(2*y_N2_arseco*bg)/2*//Nitrogênio*

// Z>H2O

// Y>N2

// W>CO2

//CALCULO DOS MOLs DOS REAGENTES

// MASSAS DOS PRODUTOS

m_CO2_gas=Wg*mm_CO2 *// Massa em gramas de CO2 após a reação*

m_H2O_gas=Zg*mm_H2O *// Massa de H2O após a reação*

m_N2_gas=Yg*mm_N2 *// Massa de N2 após a reação*

m_prod_C8H18=m_H2O_gas+m_CO2_gas+m_N2_gas *// Massa dos produtos da reação estequiometrica do C8H18*

//###################### ESTEQUIOMETRIA C2H5OH (ETANOL) ####################################

*//Equação: C2H5OH + y_N2_arseco*b*N2 + y_O2_arseco*b*O2 > Z*H2O + Y*N2 + WCO2*

We=2 *// CARBONO*

Ze=6/2 *// HIDROGÊNIO*

be=((Ze+2*We)-1)/(2*y_O2_arseco) *//OXIGÊNIO*

Ye=(2*y_N2_arseco*be)/2 *//Nitrogênio*

// Z>H2O

// Y>N2

// W>CO2

// MASSAS DOS PRODUTOS

m_CO2=We*mm_CO2 *// Massa em gramas de CO2 após a reação*

```
m_H2O=Ze*mm_H2O // Massa de H2O após a reação

m_N2=Ye*mm_N2 // Massa de N2 após a reação

m_C2H5OH=m_H2O+m_CO2+m_N2 // Massa dos produtos da reação estequiometrica do C2H5OH


// COMPOSIÇÃO VOLUMETRICA

%_prod_H2O=(m_H2O/m_C2H5OH)

%_prod_CO2=(m_CO2/m_C2H5OH)

%_prod_N2=(m_N2/m_C2H5OH)


//###################### CALCULO DO CALOR ESPECIFICO ##########################

for i=1:n_abas //loop para armazenamento das calor especifico de cada condições de operação

   Cv_ub(1,i)=%fuel(1,i)*Cv+%Ar(1,i)*Cv_arseco

   Cp_ub(1,i)=%fuel(1,i)*Cp+%Ar(1,i)*Cp_arseco

   Cv_b(1,i)=%_prod_H2O*Cv_H2O+%_prod_CO2*Cv_CO2+%_prod_N2*Cv_N2

   Cp_b(1,i)=%_prod_H2O*Cp_H2O+%_prod_CO2*Cp_CO2+%_prod_N2*Cp_N2

end


//CALCULO DA CONSTANTE DO GAS

R_CO2=R_universal/(mm_CO2/1000)

R_N2=R_universal/(mm_N2/1000)

R_H2O=R_universal/(mm_H2O/1000)

R_burned=R_CO2*%_prod_CO2+R_N2*%_prod_N2+R_H2O*%_prod_H2O

for i=1:n_abas //loop para armazenamento das calor especifico de cada condições de operação

   R_unburned(1,i)=(R_universal/(mm_arseco/1000))*%Ar(1,i)+(R_universal/(mm/1000))*%fuel(1,i)

   R_medio(1,i)=(R_unburned(1,i)+R_burned)/2

end
```

```
//_____LOOP PARA CALCULO DE VOLUME _____

cranks_vol = -180:0.05:180;

n_vol = length(cranks_vol);

volume = zeros(n_vol, 1);


for k = 1:n_vol

   theta_deg = cranks_vol(k);

   theta_rad = theta_deg * %pi / 180;

   s_theta = a_virabrequim * cos(theta_rad) + sqrt(l^2 - (a_virabrequim^2 * sin(theta_rad)^2));

   V_theta = Vc + Ac * (l + a_virabrequim - s_theta);

   volume(k,1) =theta_deg

   volume(k,2) = V_theta; // Convertido para m³

end


//_____LOOP PARA CALCULO DE WIEBE _____


calculos=[];// Inicializando a matriz para armazenar os cálculos


a=6.908 //Parametro definido para uma eficiência = a 0,9999

theta0=0 // Valor calculado para o passo ser 0,05 em crank

i=0.001150617034190 // Passo que vai calcular o valor da função de Wiebe considerando 0,05 de incremento no crank

//Função de Wiebe parametrizada


function [wiebe]=f(theta, m)

   wiebe=1-exp(-a*(theta-theta0)^(m+1));
```

```
endfunction
n_passos = round(1/ i);
todos_m = zeros(1, n_abas); // Para armazenar o melhor m de cada aba
// #### LOOP PRINCIPAL QUE PERCORRE CADA ABA #################
matriz_resultado_crank(:,1)=(-180:0.05:180);
for aba = 1:n_abas
//Definindo x e y que matrizes que recebem os valores de MBF experimental
   y=[0.1;0.5;0.9] //Fração de massa queimada
   x(1,1)=ai10(:,aba)//Crank MBF10
   x(2,1)=ai50(:,aba)//Crank MBF50
   x(3,1)=ai90(:,aba)//Crank MBF90
   ref_exp=(x(2,1)-x(1,1))/(x(3,1)-x(2,1)) // Coeficiente numérico de referência experimental

// Busca do melhor m entre 0.5 e 3 (pode ajustar esse intervalo)
   melhor_m = 0;
   wiebe_resultados = zeros(n_passos, 3);
   melhor_dif_ref=1
   passo=1
   for m_test = 0.1:0.01:3 //Variar o passo da interação aumenta a precisão
      m=m_test
      linha = 1;
      for theta = 0.00:i:1 //Repetição para calcular o wiebe teorico
         if linha <= n_passos then
            wiebe_resultados(linha,2) = theta;
            wiebe_resultados(linha,3) = f(theta, m);
            linha = linha + 1;
         end
```

```
    end

        [dif_mbf10,linha_mbf10]=min(abs(wiebe_resultados(:,3)-0.1)) // Encontrar a linha que tem o MBF10 mais aproximado

        [dif_mbf50,linha_mbf50]=min(abs(wiebe_resultados(:,3)-0.5))// Encontrar a linha que tem o MBF50 mais aproximado

        [dif_mbf90,linha_mbf90]=min(abs(wiebe_resultados(:,3)-0.9))// Encontrar a linha que tem o MBF90 mais aproximado

        ref_calc=(wiebe_resultados(linha_mbf50,2)-
wiebe_resultados(linha_mbf10,2))/(wiebe_resultados(linha_mbf90,2)-
wiebe_resultados(linha_mbf50,2)) // Coeficiente numérico de referência experimental

    dif_ref=abs((ref_exp-ref_calc)/ref_exp) // Calculo da diferença entre os coeficientes

        if dif_ref<melhor_dif_ref then

            melhor_dif_ref=dif_ref

            melhor_m=m

            melhor_ref_calc=ref_calc

            dur_comb=(x(3,1)-x(1,1))/(wiebe_resultados(linha_mbf90,2)-
wiebe_resultados(linha_mbf10,2))//Duração da combustão para o calculado pela diferença  entre o metodo numerico e os dados experimentais

            mbf0_10=wiebe_resultados(linha_mbf10,2)*dur_comb // Calculo tempo de MBF0-10

            mbf0_50=wiebe_resultados(linha_mbf50,2)*dur_comb// Calculo tempo de MBF0-50

            mbf0_90=wiebe_resultados(linha_mbf90,2)*dur_comb// Calculo tempo de MBF0-90

            soc=round(x(1,1)-mbf0_10) // Calculo da inicio da combustão - É necessário o arredontamento para associação com os valores  experimentais.

//Conversão para crank real

            n_linha=round(1/ i) // Calcula o número de linhas da matriz resultados

            crank=soc

            incremento=0.05

            passo=1

//Loop de repetição para converter o crank teorico (0-1) para o crank real, em posição angular do virabrequim

                while passo <= n_passos
```

```
            wiebe_resultados(passo, 1) = (crank); // Normalização para ajustar as casas decimais
            crank = crank + incremento;
            passo = passo + 1;
        end
// Inicializa matriz Wiebe se for a primeira iteração
        if aba == 1 then
            matriz_wiebe =zeros(n_passos, n_abas * 3);// Inicializando a variável para armazenar todos os resultados
        end
    end
end
linha=1
    for theta = 0.00:i:1 //Repetição para calcular o wiebe teorico
      if linha <= n_passos then
        wiebe_resultados(linha, 2) = theta;
        wiebe_resultados(linha, 3) = f(theta, melhor_m);
        linha = linha + 1;
      end
    end
// Preenche as colunas correspondentes a essa aba
        col_inicio = (aba - 1) * 3 + 1;
        col_fim = col_inicio + 2;
        matriz_wiebe(:, col_inicio:col_fim) = wiebe_resultados(:, [1 2 3 ]);
      todos_m(1,aba)=melhor_m
calculos(1,aba)=dur_comb
calculos(2,aba)=soc
step=1
```

```
linha=2

  for cr=-180:0.05:180

    if time_ref(1,aba)>cr then// Valvula de admissão aberta

      matriz_resultado_cv(step,aba+1)=0

      matriz_resultado_cv_b(step,aba+1)=0

      matriz_resultado_wiebe(step,aba+1)=0

    else// Após o fechamento de valvula

      if time_ref(1,aba)==cr then

        matriz_resultado_cv(step,aba+1) = (-4E-08 * t_ref(1,aba)^2) + 0.0004 * t_ref(1,aba) +
0.6648;// Função para calculo do Cv dos gases unburned



        matriz_resultado_cv_b(step,aba+1)=(8E-12 * t_ref(1,aba)^3)-(1E-
7*t_ref(1,aba)^2)+0.0004*t_ref(1,aba)+0.6514;

        matriz_resultado_gamma(step,aba+1)=
(matriz_resultado_cv(step,aba+1)+(R_unburned(1,aba)/1000))/matriz_resultado_cv(step,aba+1);//C
oluna 3 recebe ϒ unburned/burned

        matriz_resultado_gamma_b(step,aba+1)=
(matriz_resultado_cv_b(step,aba+1)+(R_burned/1000))/matriz_resultado_cv_b(step,aba+1);

        matriz_resultado_pressao(step,aba+1)=
(m_entrada(1,aba)*R_unburned(1,aba)*t_ref(1,aba))/volume(step,2);//Matriz para receber a pressão

        matriz_resultado_wiebe(step,aba+1)=0 // Matriz recebe o Wiebe

        matriz_resultado_calor(step,aba+1)=0 // Calor liberado

        matriz_resultado_temp(step,aba+1)= t_ref(1,aba);//Matriz para receber a temperatura

        fv(1,aba)=step// fechamento de valvula

      else// Zona unburned

        if soc>=cr then

          soc_linha=step// Condição somente para armazenar em qual linha foi o soc

          matriz_resultado_calor(step,aba+1)=0 // Calor liberado
```

```
pressao_spark(1,aba)=(m_entrada(1,aba)*R_unburned(1,aba)*(t_ref(1,aba)))/volume(2800,2)
//Volume de -40º (30º antes do SOC)

            linha_spark=step

        matriz_resultado_cv_b(step,aba+1)=(8E-12 * matriz_resultado_temp(step-1,aba+1)^3)-
(1E-7*matriz_resultado_temp(step-1,aba+1)^2)+0.0004*matriz_resultado_temp(step-
1,aba+1)+0.6514;

        matriz_resultado_cv(step,aba+1)=(-4E-08 * matriz_resultado_temp(step-1,aba+1)^2) +
0.0004 * matriz_resultado_temp(step-1,aba+1) + 0.6648;

        matriz_resultado_gamma(step,aba+1)= (matriz_resultado_cv(step-
1,aba+1)+(R_unburned(1,aba)/1000))/matriz_resultado_cv(step-1,aba+1);

        matriz_resultado_gamma_b(step,aba+1)= (matriz_resultado_cv_b(step-
1,aba+1)+(R_burned/1000))/matriz_resultado_cv_b(step-1,aba+1);

        matriz_resultado_wiebe(step,aba+1)=0

        matriz_resultado_pressao(step,aba+1)= (((1/(matriz_resultado_gamma(step,aba+1)-
1))*matriz_resultado_pressao(step-1,aba+1)*volume(step,2))/(matriz_resultado_crank(step,1)-
matriz_resultado_crank(step-
1,1)))/((((matriz_resultado_gamma(step,aba+1)/(matriz_resultado_gamma(step,aba+1)-
1))*(volume(step,2)-volume(step-1,2)))/(matriz_resultado_crank(step,1)-
matriz_resultado_crank(step-1,1)))+(((1/(matriz_resultado_gamma(step,aba+1)-
1))*volume(step,2))/(matriz_resultado_crank(step,1)-matriz_resultado_crank(step-1,1))));

            if abs(matriz_resultado_crank(step,1)-matriz_resultado_crank(fv(1,aba),1))<10 then

               matriz_resultado_polit(step,aba+1)= 1.325//Coeficiente politropico

            else

               matriz_resultado_polit(step,aba+1)= (log(matriz_resultado_pressao(step,aba+1))-
log(matriz_resultado_pressao(step-200,aba+1)))/(log(volume(step-200,2))-log(volume(step,2)))

            end


matriz_resultado_temp(step,aba+1)=(t_m_ub(1,aba)*((matriz_resultado_pressao(step,aba+1)/(press
ao_spark(1,aba)))^((matriz_resultado_polit(step,aba+1)-
1)/matriz_resultado_polit(step,aba+1))))*ef_compressao(1,aba)

         else// Zona burned

            if cr<matriz_wiebe(869,(aba - 1) * 3 + 1) then

               matriz_resultado_wiebe(step,aba+1)=matriz_wiebe(linha,3*aba);

               linha=linha+1
```

```
            else

            matriz_resultado_wiebe(step,aba+1)=1;

        end


matriz_resultado_calor(step,aba+1)=((PCI*m_fuel(1,aba)*matriz_resultado_wiebe(step,aba+1)*ef_c
ombustao(1,aba))-(PCI*m_fuel(1,aba)*matriz_resultado_wiebe(step-
1,aba+1)*ef_combustao(1,aba)))/0.05;

        matriz_resultado_cv_b(step,aba+1)= (8E-12 * matriz_resultado_temp(step-1,aba+1)^3)-
(1E-7*matriz_resultado_temp(step-1,aba+1)^2)+0.0004*matriz_resultado_temp(step-
1,aba+1)+0.6514;

        matriz_resultado_cv(step,aba+1) = (-4E-08 * matriz_resultado_temp(step-1,aba+1)^2) +
0.0004 * matriz_resultado_temp(step-1,aba+1) + 0.6648;

        matriz_resultado_gamma_b(step,aba+1)=
(matriz_resultado_cv_b(step,aba+1)+(R_burned/1000))/matriz_resultado_cv_b(step,aba+1);

        matriz_resultado_gamma(step,aba+1)=
(matriz_resultado_cv(step,aba+1)+(R_unburned(1,aba)/1000))/matriz_resultado_cv(step,aba+1);


matriz_resultado_pressao(step,aba+1)=(((matriz_resultado_calor(step,aba+1)+((1/(matriz_resultado
_gamma_b(step,aba+1)-1))*matriz_resultado_pressao(step-
1,aba+1)*volume(step,2))/(matriz_resultado_crank(step,1)-matriz_resultado_crank(step-
1,1)))/((((matriz_resultado_gamma_b(step,aba+1)/(matriz_resultado_gamma_b(step,aba+1)-
1))*(volume(step,2)-volume(step-1,2)))/(matriz_resultado_crank(step,1)-
matriz_resultado_crank(step-1,1)))+(((1/(matriz_resultado_gamma_b(step,aba+1)-
1))*volume(step,2))/(matriz_resultado_crank(step,1)-matriz_resultado_crank(step-
1,1)))))*matriz_resultado_wiebe(step,aba+1))+(((matriz_resultado_calor(step,aba+1)+((1/(matriz_res
ultado_gamma(step,aba+1)-1))*matriz_resultado_pressao(step-
1,aba+1)*volume(step,2))/(matriz_resultado_crank(step,1)-matriz_resultado_crank(step-
1,1)))/((((matriz_resultado_gamma(step,aba+1)/(matriz_resultado_gamma(step,aba+1)-
1))*(volume(step,2)-volume(step-1,2)))/(matriz_resultado_crank(step,1)-
matriz_resultado_crank(step-1,1)))+(((1/(matriz_resultado_gamma(step,aba+1)-
1))*volume(step,2))/(matriz_resultado_crank(step,1)-matriz_resultado_crank(step-1,1)))))*(1-
matriz_resultado_wiebe(step,aba+1))) ;//Calculo de pressão

        matriz_resultado_polit(step,aba+1)=     (log(matriz_resultado_pressao(soc_linha,aba+1))-
log(matriz_resultado_pressao(soc_linha-200,aba+1)))/(log(volume(soc_linha-200,2))-
log(volume(soc_linha,2)))


matriz_resultado_temp(step,aba+1)=((((((matriz_resultado_pressao(step,aba+1)*volume(step,2))/(m
_entrada(1,aba)*R_medio(1,aba)))-(matriz_resultado_temp(soc_linha,aba+1)*(1-
matriz_resultado_wiebe(step,aba+1))*(R_unburned(1,aba)/R_medio(1,aba))))/(matriz_resultado_wi
ebe(step,aba+1)*(R_burned/R_medio(1,aba))))*matriz_resultado_wiebe(step,aba+1))+(matriz_result
ado_temp(soc_linha,aba+1)*(1-matriz_resultado_wiebe(step,aba+1))))*ef_expansao(1,aba)
```

```
            end
            matriz_pressao_spark(:,aba)=pressao_spark(1,aba)
          end
      p_max(aba,1)=(max(matriz_resultado_pressao(:,aba+1)))/10^5
      p_max(aba,2)=p_max_ref(1,aba)
      p_max(aba,3)=(1-(p_max(aba,2)/p_max(aba,1)))*100
      end
      step=step+1
   end
end
matriz_resultado_cv(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_cv_b(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_temp(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_gamma(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_gamma_b(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_pressao(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_wiebe(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_calor(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)
matriz_resultado_polit(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)

//_____LOOP PARA O CALCULO DO NOx
_____

for aba=1:n_abas
n_linha=length(matriz_resultado_crank)
linha=1
   for passo=1:n_linha
```

```
if passo==1 then

   dt(linha,aba)=0

else

   dt(linha,aba)=(matriz_resultado_crank(linha,1)-matriz_resultado_crank(linha-
1,1))/(6*rotação(1,aba))

end

matriz_resultado_kp(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)

matriz_resultado_kf1(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1)

matriz_resultado_mO2(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1) //kmol/m3

matriz_resultado_mN2(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1) //kmol/m3

matriz_resultado_dNOdt(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1) //kmol/m3.s

matriz_resultado_dxNOdt(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1) //ppm/s

matriz_resultado_int_NO(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1) //kmol/m3

matriz_resultado_NO(:,1)=matriz_resultado_crank(:,1) //ppm

if passo<fv(1,aba) then

   matriz_resultado_kp(linha,aba+1)=0

   matriz_resultado_kf1(linha,aba+1)=0

   matriz_resultado_mO2(linha,aba+1)=0

   matriz_resultado_mN2(linha,aba+1)=0

   matriz_resultado_dNOdt(linha,aba+1)=0

   matriz_resultado_dxNOdt(:,1)=0

   matriz_resultado_int_NO(linha,aba+1)=0

   matriz_resultado_NO(linha,aba+1)=0

else

   matriz_resultado_kp(linha,aba+1)=101325 * (exp(-176406 / (R_universal *
matriz_resultado_temp(linha,aba+1)))) / matriz_resultado_pressao(linha,aba+1)

   matriz_resultado_kf1(linha,aba+1)=(1.82*10^14*(exp(-
38370/matriz_resultado_temp(linha,aba+1))))*0.001*0.001
```

```
matriz_resultado_mO2(linha,aba+1)=(y_O2_arseco*matriz_resultado_pressao(linha,aba+1)/R_universal) / matriz_resultado_temp(linha,aba+1)


matriz_resultado_mN2(linha,aba+1)=(y_N2_arseco*matriz_resultado_pressao(linha,aba+1)/R_universal) / matriz_resultado_temp(linha,aba+1)


matriz_resultado_dNOdt(linha,aba+1)=ca(1,aba)*2*matriz_resultado_kf1(linha,aba+1)*((((matriz_resultado_kp(linha,aba+1)*matriz_resultado_pressao(linha,aba+1))/R_universal)/matriz_resultado_temp(linha,aba+1))^0.5)*matriz_resultado_mN2(linha,aba+1)*(matriz_resultado_mO2(linha,aba+1)^0.5)

        if passo==1 then

           matriz_resultado_int_NO(linha,aba+1)=0

           matriz_resultado_NO(linha,aba+1)=0

           matriz_resultado_dxNOdt(:,1)=0

           else


matriz_resultado_int_NO(linha,aba+1)=matriz_resultado_dNOdt(linha,aba+1)*dt(linha,aba)+matriz_resultado_int_NO(linha-1,aba+1)


matriz_resultado_NO(linha,aba+1)=(1000000*matriz_resultado_int_NO(linha,aba+1)*R_universal*matriz_resultado_temp(linha,aba+1))/matriz_resultado_pressao(linha,aba+1)


matriz_resultado_dxNOdt(linha,aba)=(1000000*matriz_resultado_dNOdt(linha,aba+1)*R_universal*matriz_resultado_temp(linha,aba+1))/matriz_resultado_pressao(linha,aba+1)

         end

      end

   linha=linha+1

   NO(aba,1)=matriz_resultado_NO(7201,aba+1)

   NO(aba,2)=NO_ref(1,aba)

   NO(aba,3)=(1-(NO(aba,2)/NO(aba,1)))*100

   end

end
```