

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS** Faculdade de Engenharia Mecânica

FRANCISCO RENATO DOS SANTOS JÚNIOR

# Estudo de um modelo computacional para prever a ocorrência da detonação em um motor avançado a etanol

CAMPINAS 2017

### FRANCISCO RENATO DOS SANTOS JÚNIOR

# Estudo de um modelo computacional para prever a ocorrência da detonação em um motor avançado a etanol

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Mecânica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica, na Área de Mecânica dos Sólidos e Projeto mecânico.

Orientador: Prof. Dr. Janito Vaqueiro Ferreira

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA PELO ALUNO FRANCISCO RENATO DOS SANTOS JÚNIOR, E ORIENTADA PELO PROF. DR. JANITO VAQUEIRO FERREIRA.

onionat ASSINATURA DO ORIENTADOR

CAMPINAS 2017

Ficha catalográfica Universidade Estadual de Campinas Biblioteca da Área de Engenharia e Arquitetura Luciana Pietrosanto Milla - CRB 8/8129

Sa59e	Santos Júnior, Francisco Renato dos, 1990- Estudo de um modelo computacional para prever a ocorrência da detonação em um motor avançado a etanol / Francisco Renato dos Santos Júnior. – Campinas, SP : [s.n.], 2017.
	Orientador: Janito Vaqueiro Ferreira. Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Mecânica.
	1. Detonação. 2. Combustão. 3. Etanol hidratado. 4. Motores de combustão interna. I. Ferreira, Janito Vaqueiro, 1961 II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Mecânica. III. Título.

### Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Study of computer model to predict the knock occurence on an advanced ethanol engine Palavras-chave em inglês: Knock Combustion Hydrous Ethanol Spark ignition engines Área de concentração: Mecânica dos Sólidos e Projeto Mecânico Titulação: Mestre em Engenharia Mecânica Banca examinadora: Janito Vaqueiro Ferreira [Orientador] Waldyr Luiz Ribeiro Gallo Armando Antônio Maria Laganá Data de defesa: 11-12-2017 Programa de Pós-Graduação: Engenharia Mecânica

## UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA COMISSÃO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA DEPARTAMENTO DE MECÂNICA COMPUTACIONAL DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

# Estudo de um modelo computacional para prever a ocorrência da detonação em um motor avançado a etanol

Autor: Francisco Renato dos Santos Junior Orientador: Prof. Dr. Janito Vaqueiro Ferreria

A Banca Examinadora composta pelos membros abaixo aprovou esta Dissertação:

rof. Dr. Janito Vaqueiro Ferreira

Prof. Dr. Waldyr Luiz Ribeiro Gallo Universidade Estadual de Campinas

Prof. Dr. Armando Antônio Maria Laganá Universidade de São Paulo

Campinas, 11 de dezembro de 2017.

Universidade Estadual de Campinas

### Dedicatória

Aos meus pais e irmãos que sempre serão minha fonte de inspiração.

### **Agradecimentos**

Agradeço primeiramente ao professor Dr. Janito Vaqueiro Ferreira pela oportunidade e confiança em mim depositados.

Ao professor Dr. Waldyr Luiz Ribeiro Gallo por está sempre disponível para me ajudar nas dúvidas e problemas.

Aos amigos do corredor Alessandro, Jair, Caio, José Ilmar, Giovana e Letícia que foram minha família durante este projeto, amizades que espero levar para o resto da minha vida.

Aos amigos Felipe Miranda e Tarik Chuery que foram minha família fora da pesquisa, amizades que estarão para sempre comigo.

Aos amigos Domingos José, Renan Caldas, Jimes Percy, Isaac Nascimento, Aderson Reis, Lairton Moura e Hildegar Ibiapina por mesmo longe sempre estarem comigo, ajudando a apoiando.

A Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP pelo espaço e ferramentas disponibilizado para a pesquisa.

A Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP pelo apoio financeiro através do processo número 2015/24187-8.

Ao Instituto Mauá de Tecnologia pelo suporte nos dados experimentais.

A PSA – Peugeot Citroen pelo suporte técnico e financeiro.

"Nós mudamos quando crescemos Somos jovens e não sabemos Que um dia envelhecemos E distraídos venceremos"

(Selvagens a Procura da Lei)

### Resumo

Neste presente trabalho é apresentado um método para a predição da ocorrência da detonação em um motor de ignição por centelha operando com etanol hidratado (E95h). O método é baseado na simulação de um motor, implementado em modelo fenomenologico de duas zonas. O modelo de predição considerando as variavéis pressão, temperatura e octanagem do combustível é formulado e calibrado com dados experimentais, baseado no *Knock Integral Method (KIM)* encontrado na literatura. Após as devidas calibrações é analisada a influência dos fatores: temperatura ambiente, temperature de parede de cilindro, umidade, octanagem, avanço e taxa de compressão. Os resultados obtidos foram coerentes e esperados apesar de utilizar baixo custo computacional e mostraram alternativas para o controle da detonação.

Palavras-chave: Detonação, Combustão, Etanol hidratado, Motores de combustão por centelha.

### Abstract

In this work it is presented a method for the prediction of the onset knock phenomenon on a spark ignition engine operating with hydrous ethanol (E95h). The method is based on the simulation of the engine, implemented in a two-zone non-dimensional model. A knock model considering multi-variable effects including pressure, temperature and octane number is formulated and calibrated with experimental data, based on Knock Integral Method found in literature. After the calibration, it is analysed the influence of such factors: ambient temperature, cylinder wall temperature, relative humidity, octane number and compression rate. The obtained results were coherent and expected despite low computational cost required and showed alternative ways to control knock occurrence.

Keywords: Knock, Combustion, Hydrous Ethanol, Spark ignition engines.

### Lista de llustrações

Figura 2.1: Estrutura de um motor 4 tempos ciclo OTTO (Dutra, 2010)20
Figura 2.2: Curva de pressão (p) em função do ângulo de manivela ( $\alpha$ ) para um ciclo normal e
com detonação, tendo como referência o ponto morto superior (TDC) (Lasocki., 2015)22
Figura 2.3: Curva de pressão (p) em função do volume da câmera de combustão (V), tendo
como referência o ponto morto superior (TDC) (Lasocki., 2015)22
Figura 2.4: Diferentes intensidades de detonação (Ferguson, 2015)23
Figura 2.5: Vista de um pistão danificado devido a detonação (Weissinger, 2015)24
Figura 2.6: Dano em componente mecânico do motor causado pela detonação (Weissinger,
2015)
Figura 2.7: Curva de pressão de um motor utilizando gasolina com atuação do controle de
detonação (Mauá, 2016)26
Figura 2.8: Curva de pressão de um motor utilizando gasolina sem atuação do controle de
detonação (Mauá, 2016)27
Figura 2.9: Curva de consumo específico de combustível de um motor utilizando gasolina com
atuação do controle de detonação (Mauá, 2016)28
Figura 2.10: Combustão normal a partir da centelha (Ganestam, 2010)29
Figura 2.11: Aumento da pressão e temperatura do end gas conforme a frente de chama se
propaga através do cilindro (Ganestam, 2010)
Figura 2.12: Ignição do end gas devido a exposição suficiente a alta pressão e temperatura
(Ganestam, 2010)
Figura 3.1: Tempo para auto ignição seguindo dois caminhos diferentes A e B (Livengood e
Wu, 1955)40
Figura 3.2: Relação entre $t/\tau$ seguindo a combinação dos caminhos A e B (Livengood e Wu,
1955)
Figura 4.1: Gráfico Avanço x Rotação para situação de <i>Knock</i> (Autor, 2017)47
Figura 4.2: Gráfico Avanço x Rotação para situação de não <i>Knock</i> (Autor, 2017)47
Figura 4.3: Análise da variável C1 para condição de <i>knock</i> moderado (Autor, 2017)48
Figura 4.4: Análise da variável C2 para condição de <i>knock</i> moderado (Autor, 2017)49
Figura 4.5: Análise da variável C3 para condição de <i>knock</i> moderado (Autor, 2017)49
Figura 4.6: Análise da variável C4 para condição de <i>knock</i> moderado (Autor, 2017)50
Figura 4.7: Análise da variável C1 para condição de não <i>knock</i> (Autor, 2017)50

Figura 4.8: Análise da variável C2 para condição de não knock (Autor, 2017)51
Figura 4.9: Análise da variável C3 para condição de não <i>knock</i> (Autor, 2017)51
Figura 4.10: Análise da variável C4 para condição de não knock (Autor, 2017)52
Figura 4.11: Relação entre KIM e ocorrência do knock moderado (Autor, 2017)53
Figura 4.12: Relação entre KIM e ocorrência do não knock (Autor, 2017)53
Figura 4.13: Relação entre KIM e ocorrência do knock moderado corrigido (Autor, 2017)54
Figura 4.14: Relação entre KIM e ocorrência do não knock corrigido (Autor, 2017)55
Figura 4.15: Influência da temperatura ambiente na ocorrência do knock para condições de
knock moderado (Autor, 2017)
Figura 4.16: Influência da temperatura ambiente na ocorrência do knock para condições de não
knock (Autor, 2017)
Figura 4.17: Influência da temperatura de parede de cilindro na ocorrência do knock para
condições de <i>knock</i> moderado (Autor, 2017)58
Figura 4.18: Influência da temperatura de parede de cilindro na ocorrência do knock para
condições de não <i>knock</i> (Autor, 2017)
Figura 4.19: Influência das temperaturas ambientes e de parede de cilindro extremas na
ocorrência do <i>knock</i> para condições de <i>knock</i> moderado (Autor, 2017)59
Figura 4.20: Influência das temperaturas ambientes e de parede de cilindro extremas na
ocorrência do <i>knock</i> para condições de não <i>knock</i> (Autor, 2017)60
Figura 4.21: Influência da octanagem na ocorrência do knock para condições de knock
moderado (Autor, 2017)
Figura 4.22: Influência da octanagem na ocorrência do knock para condições de não knock
(Autor, 2017)
Figura 4.23: Influência da umidade relativa na ocorrência do knock para condições de knock
moderado (Autor, 2017)
Figura 4.24: Influência da umidade relativa na ocorrência do knock para condições de não knock
(Autor, 2017)
Figura 4.25: Influência do avanço aumentando um grau na ocorrência do knock para condições
de <i>knock</i> moderado (Autor, 2017)64
Figura 4.26: Influência do avanço diminuindo um grau na ocorrência do knock para condições
de não <i>knock</i> (Autor, 2017)64
Figura 4.27: Influência da taxa de compressão na ocorrência do knock para condições de knock
moderado (Autor, 2017)65

Figura 4.28:	Influência	da taxa	de compressão	na	ocorrência	do	knock para	condições	de não
knock (Auto	r, 2017)			••••					66

### Lista de Tabelas

Tabela 2.1: Diferentes condições dos testes research e motor (Subbarao, 2016)	34
Tabela 2.2: Octanagem da gasolina pura e do etanol (Anderson et al., 2012)	35
Tabela 3.1: Comparação entre modelos de predição de detonação utilizando cinética q	uímica
(Wang et al., 2016)	39
Tabela 3.2: Correlações empíricas para predição de auto ignição (Chen, 2014)	43
Tabela 4.1: Dados técnicos do motor utilizado para os dados experimentais (Autor, 2017)	46

### Lista de Abreviaturas e Siglas

- $\alpha$  Ângulo de manivela
- $\tau$  Atraso de autoignição
- 3D-3 Dimensões
- atm Atmosfera
- C Celsius
- CFD Computational Fluid Dynamics
- CFR Cooperative Fuel-Research Committee
- ECU Controle Eletrônico do motor
- EGR Recirculação de gases de escape
- IAD –Índice anti detonante
- kHz kilohertz
- KIM Knock Integral Method
- MBT Ponto de máximo torque
- MON Motor Octane Number
- ON-Octanagem
- N Rotação
- p-Pressão
- PMI Ponto morto inferior
- PMS Ponto morto superior
- RON Research Octane Number
- RPM Rotação por minuto

SINDIPEÇAS - Sindicato Nacional da Industria de Componentes para Veículos automotores

T – Temperatura

- TDC Top Dead Center
- TEL Chumbo tetraetila
- V Volume da câmara de combustão

### Sumário

1.	Introdução	17
	1.1. Motivação e objetivo	17
	1.2. Organização	18
2.	Revisão Bibliográfica	19
	2.1. Ciclo Otto	19
	2.2. Detonação	21
	2.2.1. Geral	21
	2.2.2. Autoignição	28
	2.2.3. Métodos de detecção	31
	2.2.4. Métodos de Supressão	32
	2.3. Octanagem	33
	2.4. Modelos de simulação e seu papel no desenvolvimento de motores	35
3.	Metodologia	38
	3.1. Método de Predição	38
	3.2. Simulador Termodinâmico	44
	3.3. Calibração	46
4.	Resultados Experimentais e Discussões	47
	4.1. Configuração Experimental	47
	4.2. Ajuste do Modelo de detonação	49
	4.3. Influência de Fatores Externos na Ocorrência da detonação	56
	4.3.1. Influência da temperatura ambiente e de parede de cilindro	56
	4.3.2. Influência da octanagem	60
	4.3.3. Influência da umidade relativa	62
	4.3.4. Influência do Avanço	63
	4.3.5. Influência da taxa de compressão	64
5.	Conclusão	67
	5.1. Sugestões para trabalhos futuros	68
	Referências	69

Anexo A	74
Anexo B	75
Anexo C	76

### 1 INTRODUÇÃO

O planeta Terra possui hoje mais de 1 bilhão de veículos automotores em circulação. Segundo dados do Sindicato Nacional da Industria de Componentes para Veículos automotores – SINDIPEÇAS, o Brasil fechou o ano de 2016 com uma frota 42,87 milhões entre carros, comerciais leves, caminhões e ônibus.

Deste total, 90,2% utilizam como combustível álcool ou gasolina (Sindipeças, 2016) e motores a combustão interna por centelha.

Nos últimos 20 anos, a tecnologia dos motores de combustão interna utilizando ciclo Otto em carros tem sido incrementada significativamente, deixando de lado a preocupação principal com o aumento de velocidade máxima e dando lugar a dirigibilidade, frenagem, vida útil, segurança e fatores ambientais (Silva, 2014).

Em motores de combustão interna, economia de combustível, baixa emissão de poluentes e desempenho são críticos para o usuário e para a estratégia das montadoras devido a questões ambientais e econômicas.

### 1.1 Motivação e Objetivo

Um dos principais inimigos dos motores de combustão interna é a ocorrência do fenômeno de detonação. Este fenômeno provoca danos aos componentes do motor, limita a taxa de compressão e eficiência do motor e tem um comportamento diferente para cada combustível e cada projeto de motor.

A detonação é um problema portanto que afeta o funcionamento do motor e deve ser corrigido para não comprometer a vida útil do motor, evitar consumo exagerado, e a emissão exagerada de poluentes na atmosfera. Limitar este efeito da detonação é portanto a motivação deste trabalho.

O objetivo principal deste trabalho consiste no desenvolvimento de um modelo que possa prever a ocorrência do fenômeno de detonação em um motor de combustão interna por centelha utilizando como combustível o etanol. Os objetivos específicos são implementar o modelo desenvolvido no programa de simulação de motores sendo desenvolvido no projeto FAPESP 2013/50238-3, validar o modelo desenvolvido através de dados experimentais disponibilizados pelo Instituto Mauá de Tecnologia e verificar a influência de alguns fatores como: temperatura ambiente, temperatura de parede de cilindro, umidade relativa, octanagem do combustível, avanço da centelha de ignição e taxa de compressão na ocorrência da detonação.

Este projeto de mestrado processo FAPESP 2015/24187-8 está vinculado ao projeto principal FAPESP 2013/50238-3, Estudo Conceitual de um motor avançado a etanol.

#### 1.2 Organização

Esta dissertação está organiza em cinco capítulos. No capítulo 1 são apresentados a contextualização da proposta, a motivação e os objetivos pretendidos. No Capítulo 2 é feito uma revisão bibliográfica dos assuntos relacionados com a pesquisa, sendo eles: combustão, motores de combustão interna utilizando ciclo Otto, detonação, octanagem do combustível e métodos de simulação. No Capítulo 3 são explicados a metodologia de trabalho descrevendo o modelo de predição utilizado, o simulador termodinâmico e a calibração do modelo. No capítulo 4 são mostrados os resultados obtidos e as discussões baseadas nestes resultados, considerando a influência quantitativa de alguns parâmetros na ocorrência da detonação. No capítulo 5 são apresentadas as conclusões do trabalho e sugestões para trabalhos futuros.

### 2 REVISÃO DA LITERATURA

Combustão é a tecnologia mais antiga da humanidade, tendo sido usada por mais de um milhão de anos. Atualmente, 90% do suporte energético mundial é proveniente de processos de combustão (Warnatz, 2006).

A reação de combustão é a oxidação exotérmica de uma substância combustível ao reagir com comburente, normalmente oxigênio, que libera calor através da quebra das ligações químicas presentes nas moléculas do combustível (Turns, 2013).

Este processo utilizado em motores de combustão interna, gera calor (energia térmica) através da queima da mistura ar combustível dentro do sistema e é convertido em enérgica mecânica.

Motores de combustão têm sido as fontes dominantes de força para carros, caminhões, navios e trens não elétricos. Os carros utilizam motores com ciclo Otto, enquanto que caminhões, navios e trens utilizam motores com ciclo Diesel.

A principal diferença entre os ciclos Otto e Diesel é que no ciclo Otto para iniciar a combustão é necessário uma centelha enquanto que no ciclo Diesel a compressão da mistura já é suficiente para iniciar o processo combustão.

### 2.1 Ciclo Otto

O Ciclo Otto foi idealizado pelo engenheiro alemão Nikolaus Otto que construiu o primeiro motor de combustão interna. Os motores atuais mantêm o mesmo princípio e estão em constante atualização tecnológica, buscando alcançar melhores índices de potência, consumo e emissão de poluentes (Struchtrup, 2014).

Esta máquina geradora de força motriz vem evoluindo gradativamente com o avanço da tecnologia e novos estudos aplicados a materiais e combustíveis com o objetivo de deixa-lo com uma eficiência energética melhor.

O motor de combustão interna admite o ar da atmosfera, o combustível do tanque, une estes dois elementos formando a mistura proporcional de ar mais combustível com uma relação definida, podendo ser rica, pobre ou estequiométrica, e finalmente comprime a mesma em um local denominado câmara de combustão.

Depois que esta mistura está comprimida pelo pistão na câmara de combustão o sistema de ignição, sincronizado com o motor, gera uma centelha elétrica nas velas de ignição localizadas dentro da câmara inflamando a mistura, dando início a combustão e consequentemente um deslocamento de massa impulsionando o pistão para baixo e gerando força, torque e movimento rotativo. Este processo é finalizado com a expulsão dos gases queimados para fora do motor.

Os componentes básicos de um motor que trabalha com o ciclo OTTO podem ser vistos na figura (2.1).



Figura 2.1: Estrutura de um motor 4 tempos ciclo OTTO (Dutra, 2010).

#### 2.2 Detonação

#### 2.2.1 Geral

Em uma combustão normal, quando a vela de ignição dispara a centelha, acontece o início das reações de combustão, e se forma um *kernel* admitido esférico chamado de núcleo de chama (Turns, 2013).

A superfície do núcleo da chama, conhecido como frente de chama, avança de forma progressiva por toda a mistura contida na câmara de combustão, dando tempo para que os gases possam se expandir e assim gerar a força do motor.

Esta combustão pode acontecer de forma espontânea, porém não de forma progressiva e aproveitando toda a mistura, e sim, instantânea sem dar tempo para que os gases se expandam (Heywood, 1988).

Neste caso, o pico de pressão é diferente do pico de uma combustão normal e em conjunto com a velocidade supersônica de propagação da chama geram ondas de pressão que ricocheteiam diversas vezes nas paredes da câmara de combustão, caracterizando a ocorrência da detonação. Desse fenômeno é que surge um som característico chamado de "batida de pino", e por isso também é conhecido como *knock*. (Manavella, 2014).

As figuras (2.2) e (2.3) ilustram a variação dos picos de pressão no ciclo provocados pela detonação.



Figura 2.2: Curva de pressão (p) em função do ângulo de manivela ( $\alpha$ ) para um ciclo normal e com detonação, tendo como referência o ponto morto superior (TDC) (Lasocki, 2015).



Figura 2.3: Curva de pressão (p) em função do volume da câmera de combustão (V), tendo como referência o ponto morto superior (TDC) (Lasocki, 2015).

No advento do desenvolvimento automotivo, o fenômeno da detonação foi sempre comum em motores por ignição de centelha, de modo que se pensava que tal fenômeno fazia parte de uma combustão normal (Ramos, 1989).

Na década de 30 as indústrias de petróleo e automotivas dos Estados Unidos concluíram que detonação atuava como fator limitante na durabilidade do motor e iniciaram as pesquisas para padronizar o quão resistente é um dado combustível ao fenômeno da detonação (Beccari et al., 2014).

A intensidade da detonação pode variar dependendo das condições de operação do motor, podendo ser considerada leve, moderada ou intensa.

A figura (2.4) mostra a influência da intensidade de detonação no pico de pressão provocado.



Figura 2.4: Diferentes intensidades de detonação (Ferguson, 2015).

A detonação cria uma combustão com caráter explosivo com pressão e velocidades violentas dentro da câmara, e como o motor não pode efetivamente utilizar esta energia, ela é dissipada na forma de calor e vibrações de alta frequência, que podem exercer esforços sobre os pistões e anéis além dos seus limites de resistência mecânica (Manavella, 2014).

Ela é considerada a razão principal do aumento do desgaste do motor. É provado experimentalmente que motores operando sob condições de detonação são mais suscetíveis a ter erosão nos pistões e peças vizinhas (Johansson, 2006).

O impacto do *knock* depende da intensidade e da duração. *Knock* leve não possui efeitos deteriorantes na performance ou durabilidade do motor, podendo ser desejado se ele aumentar a velocidade da combustão em um ponto do ciclo no qual a velocidade da chama está diminuindo (Cuttler, 1988).

*Knock* intenso pode provocar danos extremos ao motor. Pulsos de pressão extremamente altos, em torno de 180 bar com o *range* de frequência entre 5 e 10 kHz podem ser gerados localmente na região da mistura ar combustível que ainda não foi alcançada pela frente de chama ou *end gas* (Obert, 1973).

Pontos de alta pressão na câmara de combustão fazem com que os gases vibrem e colidam nas paredes da câmara permitindo um aumento do calor perdido para as paredes do cilindro e assim maior temperatura na superfície, enfraquecendo o material do cilindro (Topinka, 2003).

As figuras (2.5) e (2.6) ilustram os danos causados aos pistões que sofrem exposição prolongada a detonação:



Figura 2.5: Vista de um pistão danificado devido a detonação (Weissinger, 2015).



Figura 2.6: Dano em componente mecânico do motor causado pela detonação (Weissinger, 2015).

Além dos danos causados aos componentes mecânicos do motor, a detonação é um fator limitante para a taxa de compressão máxima permitida para cada combustível, pois os combustíveis possuem uma taxa máxima de trabalho para que não haja a detonação (Heywood, 1988).

Taxa de compressão é o valor numérico que indica a quantidade de vezes que o volume dentro do cilindro foi comprimido, dividindo o volume do ponto morto inferior (PMI) pelo volume do ponto morto superior (PMS).

Uma alta razão de compressão permite uma maior temperatura final de combustão para uma determinada quantidade de combustível, fazendo com que a velocidade de reação seja maior e assim maior curso útil, já que a força motriz da expansão dos gases acontece mais cedo gerando um período de trabalho no cilindro maior (Ferguson, 2015). Uma maior taxa de compressão implica em um motor mais eficiente para um determinado consumo de combustível.

Outra limitação decorrente do fenômeno de detonação é o ponto de máximo torque (MBT), que é o ponto de avanço ideal para cada rotação que produza o melhor torque e a maior eficiência. O ponto de avanço é o momento em que a vela dispara a centelha para início da combustão.

O MBT é limitado quando existe a ocorrência de detonação, e então o comando do motor faz com que o ponto de operação deste seja no limite da detonação, perdendo potência e aumentando o consumo de combustível (Zhu et al., 2007).

A figura (2.7) mostra um perfil de pressão por ângulo de manivela durante um ciclo de um motor utilizando gasolina funcionando a 1000 rotações por minuto (RPM) e



combustão estequiométrica, no qual o controle do motor atua atrasando o ponto de ignição para tirar da condição de detonação e assim perdendo potência.

Figura 2.7: Curva de pressão de um motor utilizando gasolina com atuação do controle de detonação (Mauá, 2016).

A figura (2.8) mostra um perfil de pressão por ângulo de manivela durante um ciclo de um motor utilizando gasolina funcionando a 3000 RPM e combustão estequiométrica, fora da condição de detonação. Não há a necessidade do controle atuar e assim não há perda de potência como acontece na figura (2.7) com o aparecimento de dois picos de pressão e diminuição da pressão máxima.



Figura 2.8: Curva de pressão de um motor utilizando gasolina sem atuação do controle de detonação (Mauá, 2016).

A figura (2.9) mostra uma outra estratégia de correção da detonação em rotações mais baixas através do enriquecimento da mistura, consequentemente com maior consumo de combustível para o mesmo motor da figura (2.7), resultando em um consumo em baixas rotações equivalente ao consumo em altas rotações.



Figura 2.9: Curva de consumo específico de combustível de um motor utilizando gasolina com atuação do controle de detonação (Mauá, 2016).

#### 2.2.2 Autoignição

A teoria mais aceita para ocorrência da detonação é a autoignição do *end gas*. Esta teoria postula que o *end gas* alcança temperatura e pressão suficientemente altas para fazer a mistura entrar em autoignição em um ou mais pontos (Konig, 1990).

A reação química entre o combustível e o ar tem início assim que eles são misturados. Durante a admissão e início da compressão, a taxa de reação é lenta devido as baixas condições de temperatura e pressão.

Após a centelha iniciar a queima da mistura, a frente de chama atravessa a câmara de combustão. Durante este período, o *end gas* é comprimido pela expansão da parte queimada da mistura, aumentando sua temperatura e pressão a um ponto crítico onde ocorre a autoignição (Soylu, 2001).

A autoignição do *end gas* ocorre quando a energia liberada pela reação química é maior que o calor perdido para a vizinhança. Se a liberação de energia química do *end gas* é suficientemente rápida, ondas de pressão são criadas caracterizando a detonação (Spicher, 1991).

As figuras (2.10), (2.11) e (2.12) mostram como seria uma combustão normal e ilustram como a autoignição ocorre:



Figura 2.10: Combustão normal a partir da centelha (Ganestam, 2010).



Figura 2.11: Aumento da pressão e temperatura do *end gas* conforme a frente de chama se propaga através do cilindro (Ganestam, 2010).



Figura 2.12: Ignição do *end gas* devido a exposição suficiente a alta pressão e temperatura (Ganestam, 2010).

A tendência a entrar em autoignição de um motor depende de três parâmetros chaves: estado termodinâmico do *end gas* (pressão e temperatura); química da mistura; e o tempo que a mistura fica exposta a altas pressão e temperatura.

Os três parâmetros são afetados pelo *design* do motor, taxa de compressão, formato da câmara de combustão, e condições de operação do motor: pressão e temperatura de admissão; estequiometria; e rotação.

A temperatura da mistura não queimada tem a maior influência no *knock* devido as taxas de reação química serem extremamente dependentes da temperatura. Esta temperatura depende de vários parâmetros. A temperatura de admissão mais alta resultam em uma temperatura mais alta da mistura não queimada. A temperatura de parede do cilindro determina a quantidade de calor transferida para a mistura. A umidade da mistura aumenta a capacidade calorífica influenciando na temperatura da mistura. A fração de gás residual remanescente do ciclo anterior aumenta diretamente a temperatura do cilindro, impactando diretamente na ocorrência do *knock*.

O fator pressão possui menor influência do que o fator temperatura na ocorrência da detonação (Zhen et al., 2011). A pressão de admissão maior resulta em um perfil de

pressão maior por todo o processo de compressão. Quanto maior a taxa de compressão maior o incremento de pressão do *end gas*.

A composição química do *end gas* possui papel importante na determinação da detonação. As propriedades do combustível têm impacto significante na reatividade química da parte não queimada.

A estequiometria da combustão influencia na velocidade da chama, temperatura da mistura e tempo de reação do *end gas* em relação a frente de chama. Quanto menor o tempo de reação maior a tendência a detonar (Taylor, 1985).

Misturas excessivamente ricas ou pobres diminuem a tendência a autoignição (Qi et al., 2015). Em misturas ricas, a velocidade de queima da chama não permite que haja tempo suficiente para o *end gas* entrar em ignição. Em misturas pobres, a temperatura mais baixa contribui para o *end gas* não entrar em ignição.

A velocidade de rotação governa de forma absoluta o tempo que o *end gas* fica dentro do cilindro. Em rotações mais altas, o tempo de residência da mistura é menor, e a turbulência aumenta a velocidade da chama, contribuindo para a não ocorrência da detonação (Galloni, 2012).

Baixas rotações são mais suscetíveis já que nessas circunstancias cada ciclo precisa queimar mais combustível durante mais tempo resultando em uma maior temperatura e pressão dentro do cilindro, propiciando a ocorrência da autoignição (Boretti, 2010).

#### 2.2.3 Detecção

Projetos de sistemas de controle da detonação fazem uso de instrumentos que monitoram o processo de combustão e fornecem a necessária realimentação à unidade de controle eletrônico do motor (ECU), (Horner, 1995). Os sistemas de detecção de detonação são divididos em duas categorias: medição direta e medição remota.

No método de medida direta, sensores medem a pressão no interior da câmara de combustão do motor em funcionamento, fornecendo qualitativamente o melhor sinal para se analisar e detectar a detonação (Fernandez, 2006).

Como não se sabe a priori em qual cilindro acontecerá primeiro a detonação, se faz necessário o uso de um sensor por cilindro. Como cada sensor de pressão ainda apresenta um alto custo, ele normalmente é utilizado somente em pesquisa.

No método de medida remota, os sensores utilizam as vibrações transmitidas através da estrutura do motor para detectar a detonação na câmara de combustão. Ao contrário do método de medida direta, os sinais recebidos pelos sensores normalmente estão contaminados por outras fontes de sinais que não apenas a detonação, e por isso precisam ser processados e calibrados.

Em altas rotações em que o ruído de fundo das vibrações mecânicas é grande, o uso de medida remota é mais difícil, o que diminui efetivamente a relação sinal ruído (Fernandez, 2006). Em contrapartida, possui um custo mais barato e operam e um ambiente menos agressivo.

2.2.4 Métodos de supressão

Limitar a ocorrência da detonação é um dos maiores desafios no aperfeiçoamento de motores de combustão interna. *Knock* pode ser efetivamente atenuado através das seguintes estratégias (Zhen et al., 2011):

- Reduzir a temperatura do *end gas*, que pode ser efetivamente reduzida através do atraso do disparo da centelha de ignição, mesmo que este atraso possa diminuir a performance do motor.
- Reduzir o tempo de combustão reduzindo a distância de propagação da frente de chama através da otimização de design da câmara de combustão e da localização da vela de ignição.
- Diminuir a taxa de compressão através de tecnologias de taxa de compressão variável.
- Desenvolver combustíveis alternativos com maior octanagem ou utilizar aditivos antidetonantes nos combustíveis.
- Aumentar a concentração de gases inertes. A adição de nitrogênio  $(N_2)$  e dióxido de carbono  $(CO_2)$  possuem bons resultados na prevenção do *knock*

pois ajudam no controle da temperatura dentro da câmara de combustão (Brecq et al., 2003).

• Utilizar recirculação de gases de escape (EGR) para diminuir a temperatura do *end gas* (Zhen et al., 2011).

### 2.3 Octanagem

A octanagem como citada anteriormente é definida como um índice de resistência a detonação de um determinado combustível comparado com a detonação de um combustível de referência formado por uma mistura de n-heptano (C7H16), como referência de octanagem zero (0), e o 2-2-4-trimetil pentano (iso-octano) como referência de octanagem cem (100).

Estes hidrocarbonetos foram escolhidos porque o n-heptano tinha a maior tendência a detonar e o iso-octano tinha a maior resistência a detonação comparados com os demais combustíveis disponíveis quando esta escala foi estabelecida.

Por exemplo, um combustível de octanagem 85 indica que esse produto tem a mesma tendência de detonar no motor padrão de testes sob as mesmas condições de uma mistura de combustível formada por 85% de iso-octano e 15% de n-heptano (Sanches, 2002).

A octanagem pode ser determinada de 2 maneiras diferentes através de métodos analíticos realizados com motores padrão para a observação da detonação ocasionada pelo combustível (Westbrook, 2006):

- Método RON Promove uma avaliação da resistência a detonação do combustível com o motor em baixa rotação e plena carga. Vem do inglês *Research Octane Number*, e segue a norma ASTM D2699;
- Método MON A resistência a detonação do combustível é avaliada a altas rotações e plena carga. Vem do inglês *Motor Octane Number*. Segue a norma ASTM 2700;
- Método IAD Indica a média aritmética entre os métodos RON e MON.

Os métodos RON e MON foram idealizados para medir a octanagem usando um motor de um cilindro padrão desenvolvido sob a supervisão do *Cooperative Fuel-Research Committee* (CFR) em 1931.

O motor CFR opera a 4 tempos com cilindro de 3.25 polegadas e curso de 4.25 polegadas, com a taxa de compressão variando de 3 até 30 e as diferentes condições dos testes *research* e *motor* são mostrados na tabela (2.1) (Subbarao, 2016).

-		
	Research	Motor
Temperatura do ar de entrada (°C)	52	149
Rotação (rpm)	600	900
Avanço (°TDC)	13°TDC	19-26°TDC
Temperatura de camisa (°C)	100	100
Pressão de admissão do ar (atm)	1	1
Umidade (Kg de água/Kg de ar seco)	0.0036	0.0072

Tabela 2.1: Diferentes condições dos testes research e motor (Subbarao, 2016).

O procedimento para medir a octanagem do combustível a ser testado é (Ferguson, 2015):

- Operar o motor CFR com o combustível de teste com as condições *motor* e *research*;
- Aumentar gradativamente a taxa de compressão até a ocorrência de uma quantidade padrão de detonação;
- Com a taxa de compressão definida no passo 2, operar o motor com uma mistura de referência de isooctano e n-heptano
- A octanagem do combustível testado é a porcentagem de isooctano na mistura que gera a quantidade padrão de detonação na taxa de compressão do passo 2

A tabela (2.2) mostra o índice de octanagem de alguns combustíveis:

	Gasolina	Etanol
RON	91-93	109
MON	81-84	90
AKI	87-88	99

Tabela 2.2: Octanagem da gasolina pura e do etanol (Anderson et al., 2012).

Quando os resultados obtidos por estes testes apontam que a octanagem do combustível é baixa, provavelmente se encontram presentes hidrocarbonetos de cadeias grandes, e então é necessário fazer as devidas correções para que se garanta a qualidade e evite que o combustível venha causar danos aos veículos (Westbrook, 2006).

A diferença entre os valores de octanagem MON e RON representa a sensibilidade do combustível ao método. Os valores de MON são sempre menores pois são medidos em condições de operação mais severas.

Combustíveis com maior octanagem oferecem maior resistência ao fenômeno da detonação e trabalham com taxas de compressão maiores.

Para combustíveis com octanagem acima de 100, a resistência a detonação deste é determinada por comparação com iso-octano com a adição de aditivo antidetonante conhecido como chumbo tetraetila (TEL) e fórmula (C8H20Pb).

O número de octanagem é obtido segundo a equação (2.1):

$$ON = \frac{100 + 28.28 * mt}{1.0 + 0.736 * mt + (1.0 + 1.472 * T - 0.035216 * T^2)^{1/2}}$$
(2.1)

na qual mt é o volume em mililitros de TEL por galão americano do combustível testado e T é a temperatura ambiente em que o ensaio é realizado na escala Kelvin.

#### 2.4 Modelos de simulação e seu papel no desenvolvimento de motores

Com a ampliação das técnicas experimentais, modelagem é atualmente um procedimento básico para o design, desenvolvimento e otimização de motores de combustão interna. Além disso modelagem é uma forma de melhorar o conhecimento da física e química inerente a sua operação (Medina et al., 2014).

A combinação de hipóteses simplificadoras, física básica e leis da química expressas na forma de equações matemáticas e a capacidade de computação numérica dos

computadores de trabalho são capazes de proporcionar modelos realísticos que podem ser validados através da comparação com dados de motores reais e então estimar a sensitividade das variáveis do motor em relação a vários parâmetros.

Existem 4 objetivos principais para a modelagem de motores (Heywood, 1988):

- Aperfeiçoar o conhecimento a respeito da parte física e química que governa o funcionamento dos motores;
- Analisar os principais fatores de design e operação do motor, propiciando direções mais racionais e com menor gasto experimental;
- Predizer a sensibilidade do motor a algumas variáveis controladas que ajudam a otimizar o design, controle e operação do motor;
- Predizer efeitos de inovações em design antes que estas sejam implementadas e testadas em bancada.

Modelos desenvolvidos para motores de combustão interna são divididos em duas categorias: termodinâmico e fluido dinâmico (Medina et al., 2014).

Modelos termodinâmicos podem ser divididos em uma única zona ou multi zonas. Modelos de uma zona são baseados na conservação de massa e energia através da primeira lei da termodinâmica e não possuem solução espacial porque todas as propriedades termodinâmicas são consideradas uniformes e apenas um volume de controle é utilizado.

Em modelos de multi zonas, a câmara de combustão é dividida em mais de uma zona, com cada zona possuindo propriedades termodinâmicas uniformes. A primeira lei da termodinâmica é aplicada para cada um dos volumes de controle com suas respectivas condições de fronteira. As equações matemáticas formam um conjunto de equações diferencias ordinárias cujo a variável independente é o tempo ou ângulo de manivela.

Modelos fluido dinâmicos são conhecidos como modelos *Computational Fluid Dynamics* (CFD), são inerentemente multi zonas baseadas em conservação de massa, espécies químicas, momento e energia em qualquer ponto dentro do cilindro. Matematicamente as equações iniciais são as equações de Navier-Stokes, formando um sistema de equações diferenciais parciais. Ambos tempo e espaço são considerados como variáveis independentes, tornando possível uma solução espacial da mistura dentro do cilindro.

Uma metodologia simples mas amplamente utilizada é o modelo termodinâmico de duas zonas de análise da combustão. Este modelo é também conhecido como *quasi*-
*dimensional* e foram desenvolvidos para complementar o espaço entre os modelos de uma zona e multi zonas (Hosseini et al., 2008).

Este modelo introduz uma dependência espacial nos processos de combustão e transferência de calor. Com modesto custo computacional é possível durante a combustão dividir de forma efetiva o cilindro em zona queimada e zona não queimada (Borgnakke et al.,1986).

A separação entre as duas zonas é caracterizada pela propagação da frente de chama, e fotografias experimentais mostram que as duas zonas são efetivamente formadas (Medina et al., 2014).

Esta divisão é interessante para o estudo da detonação pois ter as informações do *end gas* é fundamental para estudar a ocorrência da autoignição.

Entre as duas zonas define-se uma fronteira conhecida como frente de chama. A propagação da frente desta chama é a taxa em que a mistura não queimada é transformada em gases queimados e é geralmente assumido que não ocorre troca de calor entre as zonas (Borgnakke et al., 1986).

Existem vários modelos matemáticos para modelar a propagação da frente de chama que resultam em um conjunto de equações diferenciais para caracterizar a evolução das massas das regiões queimada e não queimada (Hosseini et al., 2008).

Durante a combustão estas equações são resolvidas simultaneamente com equações termodinâmicas para temperatura e pressão dentro do cilindro. Para resolver as equações termodinâmicas durante os processos de cada ciclo de um motor são necessários submodelos para troca de calor, atrito, fluxo de massa pelas válvulas, reações químicas, entre outros (Medina et al., 2014).

Estes submodelos decorrem de leis básicas da física e química ou são empíricos da natureza.

## **3** METODOLOGIA

A metodologia do trabalho consiste em definir um método de predição de detonação, implementar esse método em um simulador termodinâmico que forneça as informações de operação de um motor de combustão interna da zona não queimada, validar e calibrar esse método através da comparação com dados experimentais.

#### 3.1 Método de Predição

Modelos para predizer a autoignição da mistura não queimada de um motor de ignição por centelha variam de simples expressões empíricas a formulações complexas incluindo cinética química reduzida ou completa (Burluka et al., 2004).

Mecanismos de cinética química normalmente utilizam modelos de combustão zero ou quasi dimensional. Com o avanço do poder de processamento dos computadores, simulações baseadas em cinética química utilizando dinâmica dos fluidos em 3 dimensões (3-D CFD) passaram a ser importantes no estudo da detonação (Liang et al., 2007).

Em contrapartida, este método utiliza centenas de espécies químicas e milhares de reações elementares, o que requer um custo computacional demasiadamente grande. Yates (2010) ao estudar cinética química do etanol utilizou mais de 2000 reações químicas elementares.

A tabela (3.1) mostra o custo computacional requerido para modelos de predição utilizando cinética química.

Modelo de knock				Número de reações	Tempo de processamento		
					(min)		
1D	CFD	com	cinética	$10^2 - 10^3$	10 <sup>2</sup>		
detalhada							
3D	CFD	com	cinética	$10^1 - 10^2$	$10^2 - 10^3$		
reduzida							
3D	CFD	com	cinética	$10^2 - 10^3$	$10^3 - 10^5$		
detalhada							

Tabela 3.1: Comparação entre modelos de predição de detonação utilizando cinética química (Wang et al., 2016).

O alto custo computacional deste método inviabiliza a utilização neste trabalho.

Uma aproximação empírica amplamente utilizada é o princípio da conservação do atraso de autoignição proposto por Livengood e Wu (1955).

Eles estudaram a ocorrência de detonação em máquinas de compressão rápida, e relacionaram a detonação em motores de combustão interna. Foi constatado que as reações químicas que precedem uma eventual autoignição da mistura ar-combustível requerem um intervalo de tempo finito.

Este intervalo de tempo é uma função complexa do estado físico da mistura que corresponde a sua pressão e temperatura, e a sua constituição química.

Livengood e Wu propõe que uma reação global produz uma espécie química necessária para a ocorrência da autoignição e então ocorrência da detonação. Para uma dada mistura ar combustível, existe uma relação fixa entre a taxa de reação, o estado físico instantâneo e o tempo:

$$\frac{d(X)}{dt} = \phi_1(p, T, t, F, C) \tag{3.1}$$

na qual (X) é a concentração de determinado produto da reação necessário para a ocorrência da autoignição,  $\frac{d(x)}{dt}$  é a taxa de formação, t é o tempo, T é a temperatura absoluta, F é razão ar combustível e C a natureza química do combustível.

A equação (3.1) é assumida como a oxidação do combustível sintetizada em uma única reação global e a autoignição ocorre quando uma concentração crítica (Xc) é alcançado (Hernandez et al., 2014).

A substância monóxido de carbono (CO) satisfaz a condição de substância (*X*) devido a taxa de formação do (CO) ser proporcional a taxa de geração de calor durante o processo (Pan et al., 2015).

Através do estudo experimental em máquinas de compressão rápida, Livengood e Wu estabeleceram a relação entre o estado físico, a taxa de formação, e o limite de concentração crítica necessário para a autoignição. A partir dessa relação é possível predizer o tempo de ocorrência da autoignição para qualquer estado físico do processo para dada mistura ar-combustível.

Esta relação tem sido estudada e relatada como informação do atraso de autoignição para cada combustível (Douaud e Eyzat, 1978).

Este atraso de autoignição é o tempo que a mistura ar-combustível homogênea precisa ficar mantida a pressão e temperatura constante para que ela possa entrar em auto ignição, sendo representado por  $\tau$ .

O valor do atraso de autoignição  $\tau$  para cada pressão e temperatura instantânea da mistura não queimada dentro do cilindro pode ser encontrada através da equação de Arrhenius, que representa cada passo da autoignição (Sileghem et al., 2011):

$$\tau = A * p^n * e^{\frac{B}{T}} \tag{3.2}$$

em que A, n e B são parâmetros que dependem da composição da mistura.

Dois experimentos foram realizados em diferentes estados A e B, e um terceiro experimento foi realizado misturando os estados A e B, conforme mostrado nas figuras (3.1) e (3.2):



Figura 3.1: Tempo para auto ignição seguindo dois caminhos diferentes A e B em uma máquina de compressão rápida (Livengood e Wu, 1955).



Figura 3.2: Relação entre  $t/\tau$  seguindo a combinação dos caminhos A e B em uma máquina de compressão rápida (Livengood e Wu, 1955).

Para o caso C, o atraso de autoignição é:

$$\tau_c = n * \tau_a + (1 - n) * t_b \tag{3.3}$$

em que *n* é a fração de tempo exposto ao estado A, antes do próximo passo de compressão para o estado B. A equação (3.3) comprova a conservação do atraso de autoignição e pode ser aplicada independente da relação  $t/\tau$ .

Após constatar a conservação do atraso de autoignição e para aplicar os conceitos de atraso de autoignição em motores reais de combustão interna, Livengood e Wu assumiram que a taxa de formação do produto *X* necessário para a ocorrência da autoignição não muda com o tempo durante um processo de estado fixo (McKenzie, 2015). Então:

$$\left(\frac{[Xc]}{\tau}\right) = \frac{d[X]}{dt} \tag{3.4}$$

Manipulando e integrando a equação (3.4):

$$\frac{X}{X_c} = \int_{t=0}^{t=tk} \left(\frac{1}{\tau}\right) dt = 1$$
(3.5)

em que tk é quando ocorre a detonação.

De acordo com este princípio, o tempo global do atraso de ignição pode ser definido através da integração instantânea durante as fases de compressão e combustão, somando seu incremento contínuo em cada estado termodinâmico de pressão e temperatura gerado pela operação do motor em cada passo. É analiticamente expressa com o valor da integral alcançando a unidade:

$$\int_{t=t0}^{t=tk} \left(\frac{1}{\tau}\right) dt = 1 \tag{3.6}$$

em que t0 é o instante do fechamento da válvula de admissão, tk é o instante do acontecimento da detonação e  $\tau$  é o atraso de autoignição. Este método de predição é conhecido como *Knock Integral Method* (KIM).

Douaud e Eyzat (1978) são pioneiros ao utilizar o KIM e desenvolveram uma fórmula para calcular o valor do  $\tau$ , através do estudo de um motor operando em várias condições e combustíveis com octanagem entre 80 e 110.

Com os coeficientes de Douaud e Eyzat a equação (2) ficou:

$$\tau = C1 * \left(\frac{ON}{100}\right)^{C2} * p^{-c3} * e^{\frac{C4}{T}}$$
(3.7)

em que *ON* é a octanagem RON do combustível, *p* e *T* são pressão e temperatura do *end* gas e C1,C2,C3,C4 são respectivamente 17.69, 3.402, 1.7 e 3800.

A equação (3.7) é usada por vários pesquisadores, que calibraram as constantes do modelo através de comparação com dados experimentais dos seus respectivos trabalhos (Chen et al., 2014).

Esta técnica de predição é a mais usada devido a sua simplicidade e baixo custo computacional, sendo empregada neste trabalho (Chen et al., 2014).

O *Knock Integral Method* consiste em acompanhar a pressão e temperatura da região não queimada durante as fases de compressão e combustão e se a condição definida pela equação (3.6) for atingida através do uso da equação (3.7) para cada passo e mudança de estado, assume-se que ocorreu a detonação. Este acompanhamento é feito por cada passo discretizado no qual durante o passo são considerados pressão e temperatura constantes.

A combinação entre um modelo de duas zonas e o *knock integral method* corresponde a uma abordagem satisfatória para estimar a ocorrência da detonação e apresenta a vantagem de poder ser diretamente ligada a medidas experimentais de ciclos com e sem a ocorrência do *knock*.

A tabela (3.2) mostra o trabalho de outros pesquisadores que exploraram a mesma estratégia, alguns utilizando fatores corretivos para situações de trabalho específicas:

Fórmula $ au$	C1	C2	C3	C4	Pesquisador
$C1 * \left(\frac{ON}{100}\right)^{C2} * p^{-C3} * e^{C4/T}$	17,68	3,402	1,7	3800	Douaud
$C1 * \left(\frac{ON}{100}\right)^{C2} * p^{-c3} * e^{C4/T}$	0,389	7,202	1,15	5200	Wayne
$C1 * \left(\frac{RON}{100}\right)^{C2} * p^{-c3} * e^{C4/T}$	0,0187	3,402	1,7	3800	Worret
$C1 * p^{-c3} * e^{C4/T}$	0,021	-	1,7	3800	Elmqvist
$C1 * \left(\frac{ON}{100}\right)^{C2} * p^{-c3} * e^{C4/T}$	0,01869	3,4017	1,7	3800	Burluka
$C1 * p^{-c3} * e^{C4/T}$	0,985	-	0,887	5785	Syolu
$C1 * (1 - xEGR)^{-C2} * (\frac{p}{T})^{-C3} * e^{C4/T}$	8,449	0,8881	1,343	5266	Hoepke

Tabela 3.2: Correlações empíricas para predição de auto ignição (Chen et al., 2015).

#### 3.2 Simulador Termodinâmico

As informações de temperatura e pressão do *end gas* são fornecidas pelo simulador termodinâmico desenvolvido pelo grupo de pesquisa relacionado com este projeto. Para gerar essas informações o simulador reproduz as mesmas condições de operação correspondentes para *knock* moderado e para não *knock*, contidas nos anexos A e B.

O simulador usado foi desenvolvido pelo grupo de pesquisa que este trabalho faz parte e utiliza um modelo fenomenológico de duas zonas, e tem o objetivo de levantar o mapa operacional de um motor convencional e então comparar com o experimental. Para realizar a simulação dos fenômenos que acontecem no cilindro durante o ciclo termodinâmico é necessário ter conhecimento das composições dos gases no interior do cilindro.

O combustível de trabalho é o etanol hidratado 95%, representado pela sigla E95h e possui uma qualidade de mistura estequiométrica  $\lambda$ =1.

A umidade do ar é dada pela pressão do vapor no ar atmosférico. A umidade relativa do ar é dada pela razão entre a pressão parcial do vapor na temperatura ambiente. Pode-se determinar a fração molar do vapor na atmosfera pela razão entre a sua pressão parcial e a pressão atmosférica.

Na simulação, o ciclo termodinâmico foi divido em seis fases, três abertas: escape, cruzamento de válvulas, admissão, e três fechadas: compressão, combustão e expansão.

Durante as fases abertas de admissão e escape ocorre a transferência de massa pelas válvulas e esta transferência é determinada através da hipótese de escoamento semiestático, no qual o escoamento ideal é corrigido para o real através de um coeficiente de descarga. Considera-se inicialmente o escoamento adiabático, reversível e compressível, desprezando a velocidade do fluido a montante. As propriedades termodinâmicas nos coletores são considerados constantes.

A transferência de calor é modelada utilizando a correlação dada por Hohenberg e Nishiwaki. Para evitar que ocorram descontinuidades nos valores de coeficiente de película nas transições de fase é utilizado uma média.

Durante a compressão e a expansão, considera-se apenas um sistema, englobando todo o interior do cilindro a pressão P e temperatura T.

Durante a combustão, separa-se o interior do cilindro em dois sistemas: região queimada e região não queimada, *end gas*, ambos na mesma pressão e cada uma com sua respectiva temperatura. As informações sobre a região não queimada são usadas para predizer o fenômeno da detonação.

O modelo de combustão determina a velocidade e momento em que a combustão ocorre, trazendo informações sobre a liberação de energia, sendo representado pela função de Wiebe para determinar a duração da queima, velocidade e tendência assintótica.

Nas fases fechadas, compressão, combustão e expansão, admite-se que não há transferência de massa pelas fronteiras dos sistemas, desprezando o fenômeno de *blow-by*.

O modelo de simulação foi validado através do modelo de diagnóstico, que é o uso de dados experimentais compreendendo o perfil de pressão medido no cilindro e

condições de contorno do motor no momento do teste: pressão e temperaturas ambientes, vazão de combustível, razão ar-combustível entre outros, para análise de combustão. O código em MatLab do simulador está contido no anexo C.

O simulador termodinâmico fornece informações de pressão e temperatura para cada passo de 0,05° durante todo o curso do ciclo do motor de combustão interna de 720° e 4 tempos. O método de predição de detonação utiliza as informações de estado de cada passo durante toda a duração da compressão e combustão.

#### 3.3 Calibração

A calibração da equação (3.9) foi realizada através de dois passos. O primeiro passo foi estudado como cada variável se comporta durante o processo, analisando qual tem maior e qual tem menor sensibilidade.

O segundo passo foi ajustar as variáveis tendo como base os resultados experimentais.

Para a condição de *Knock* moderado ensaiado, o valor de KIM com todos os parâmetros do anexo A deve ser em torno de 1.

Para a condição de não *Knock* ensaiado, ponto que o motor trabalha com segurança sem *knock*, o valor de KIM com todos os parâmetros do anexo B deve ser menor do que 1.

# **4 RESULTADOS EXPERIMENTAIS e DISCUSSÕES**

#### 4.1 Configuração experimental

Os dados experimentais utilizados na calibração do modelo de *knock* foram obtidos através do ensaio de um motor em bancada realizado pelo Instituto Mauá de Tecnologia considerando uma configuração onde há a ocorrência de *Knock* moderado e outra configuração onde não há a ocorrência de *Knock*.

O critério para ocorrência de *Knock* é definido através da curva de pressão do ciclo do motor. Está curva de pressão é analisada pelo *software* CAS, que passa um filtro passabaixo para limpar o ruído, depois filtra com um passa-alto, eliminando a curva de pressão normal de um ciclo. O restante da informação é analisado e caso passe de uma amplitude de 2,5 bar é considerado a ocorrência de *Knock*.

Para a aquisição de dados experimentais foi utilizado um motor com as informações técnicas da tabela (4.1) operando em carga plena, combustão estequiométrica e as condições descritas nos anexos A e B, além de usar etanol hidratado (E95h) com octanagem RON de 109.

Variáveis	Valor
Cilindrada	1368cm <sup>3</sup>
Número de cilindros	3 in line
Diâmetro do Cilindro	75 mm
Curso do pistão	90.473 mm
Taxa de compressão	12.25:1
Válvula por cilindro	4

Tabela 4.1: Dados técnicos do motor utilizado para os dados experimentais (Autor, 2017).

A figura (4.1) mostra a relação entre avanço e rotação para a situação de *Knock* moderado segundo o anexo A:



Figura 4.1: Gráfico Avanço x Rotação para situação de Knock (Autor, 2017).

A figura (4.2) mostra a relação entre avanço e rotação para a situação de não *Knock* segundo o anexo B:



Figura 4.2: Gráfico Avanço x Rotação para situação de não Knock (Autor, 2017).

#### 4.2 Ajuste do modelo de detonação

Utilizando o simulador termodinâmico para fornecer as informações termodinâmicas necessárias para a predição da detonação em conjunto com a equação (3.7) foram geradas as figuras (4.3), (4.4), (4.5), (4.6), (4.7), (4.8), (4.9) e (4.10) que mostram como se comportam as variáveis C1, C2, C3 e C4 da equação (3.7) para as duas condições de operação.

Para cada figura foi analisado a influência da variação de cada constante mantendo as demais com o valor original.



Figura 4.3: Análise da variável C1 para condição de knock moderado (Autor, 2017).



Figura 4.4: Análise da variável C2 para condição de knock moderado (Autor, 2017).



Figura 4.5: Análise da variável C3 para condição de knock moderado (Autor, 2017).



Figura 4.6: Análise da variável C4 para condição de knock moderado (Autor, 2017).



Figura 4.7: Análise da variável C1 para condição de não knock (Autor, 2017).



Figura 4.8: Análise da variável C2 para condição de não knock (Autor, 2017).



Figura 4.9: Análise da variável C3 para condição de não knock (Autor, 2017).



Figura 4.10: Análise da variável C4 para condição de não knock (Autor, 2017).

A análise de cada variável considerando as condições de KIM maior que 1 para ocorrência de *knock* e KIM menor que 1 para a não ocorrência de *knock* permitiu que a equação (3.9) fosse calibrada para:

$$\tau = 17.13 * \left(\frac{ON}{100}\right)^{3.402} * p^{-1.7} * e^{\frac{3400}{T}}$$
(4.1)

As figuras (4.11) e (4.12) foram geradas através do uso da equação (4.1) com o simulador termodinâmico, utilizando todas as condições dos anexos A e B.



Figura 4.11: Relação entre KIM e ocorrência do knock moderado (Autor, 2017).



Figura 4.12: Relação entre KIM e ocorrência do não knock (Autor, 2017).

As figuras (4.11) e (4.12) mostram um comportamento decrescente do valor da KIM conforme a rotação aumenta. Esperava-se que o valor da KIM fosse aproximadamente uma reta paralela ao eixo x pois o setup do motor para ocorrência do *knock* foi similar para todas as rotações, considerando uma amplitude de pressão de 2.5 bar.

Para fazer a correção deste comportamento decrescente, este presente trabalho implementou uma adaptação na equação (4.1) com o intuito de deixar as curvas das

figuras (4.11) e (4.12) mais homogêneas conforme era esperado, utilizando a variável rotação.

Após as devidas calibrações, o modelo adotado que melhor se adequou as duas curvas foi:

$$\tau = 17.13 * \left(\frac{ON}{100}\right)^{3.402} * p^{-1.7} * e^{\frac{3400}{T}} * (N^{0,1})/2,15$$
(4.2)

na qual N é a rotação em rpm.

Após o uso do fator corretivo, a diferença máxima entre o valor entre cada ponto de rotação para das duas condições foi inferior a 4%, garantindo uma curva melhor e mais homogênea.

Utilizando o fator corretivo da equação (4.2) nas figuras (4.11) e (4.12) temos as figuras (4.13) e (4.14):



Figura 4.13: Relação entre KIM e ocorrência do knock moderado corrigido (Autor, 2017).



Figura 4.14: Relação entre KIM e ocorrência do não knock corrigido (Autor, 2017).

As figuras (4.13) e (4.14) mostram que o método para predição de detonação e o fator corretivo foram efetivos, indicando valores acima de 1 para a condição de *knock* moderado e menor que 1 para a condição de não *knock*, sendo validado considerando todos os dados experimentais e requerendo baixo custo computacional para sua execução.

#### 4.3 Influência de fatores externos na ocorrência da detonação

A partir da devida calibração do modelo, foi realizada uma análise da influência de alguns fatores durante a ocorrência da detonação: temperatura ambiente, temperatura de parede de cilindro, octanagem, umidade, avanço e taxa de compressão, com o intuito de estudar as condições necessárias para o motor sair ou entrar na condição de detonação.

4.3.1 Influência da temperatura ambiente e temperatura de parede de cilindro

As figuras (4.15) e (4.16) mostram a influência da temperatura ambiente na ocorrência do *knock*.



Figura 4.15: Influência da temperatura ambiente na ocorrência do *knock* para condições de *knock* moderado (Autor, 2017)



Figura 4.16: Influência da temperatura ambiente na ocorrência do *knock* para condições de não *knock* (Autor, 2017).

Os ensaios experimentais foram realizados nas temperaturas de 24,14 e 24,37°C. Em dias mais frios, 15 e 20°C o valor de KIM diminui, assim o motor operará mais distante da condição de *knock*. Para dias mais quentes, 30 e 35°C o valor de KIM aumenta, assim o motor trabalhará mais próximo da condição de *knock*.

As variações da temperatura ambiente considerando valores extremos, na ordem de 40% do valor experimental, provocam pequenas alterações no valor de KIM. Esta alteração não é suficiente para tirar o motor da condição de detonação para a configuração de *knock* moderado e também não é suficiente para fazer o motor detonar na configuração de não *knock*.

As figuras (4.17) e (4.18) mostram a influência da temperatura de parede de cilindro na ocorrência do *knock*.



Figura 4.17: Influência da temperatura de parede de cilindro na ocorrência do *knock* para condições de *knock* moderado (Autor, 2017).



Figura 4.18: Influência da temperatura de parede de cilindro na ocorrência do *knock* para condições de não *knock* (Autor, 2017).

A temperatura de parede de cilindro é estimada em 246,85°C. Para temperaturas mais amenas, 226,85°C e 236,85°C o motor trabalhará mais distante da condição de *knock*. Para temperaturas mais extremas, 256,85°C, 266,85°C e 276,85°C o motor operará mais próximo da condição de *knock*.

As variações da temperatura de parede do cilindro, na ordem de 10% do valor experimental, provocam alterações mais significativas no valor de KIM do que o fator temperatura ambiente mas segue o que acontece com a temperatura ambiente, não é suficiente para tirar o motor da condição de detonação para a configuração de *knock* moderado e também não é suficiente para fazer o motor detonar na configuração de não *knock*.

As figuras (4.19) e (4.20) mostram a influência dos casos mais extremos de temperatura ambiente e temperatura de parede de cilindro na ocorrência do *knock*.



Figura 4.19: Influência das temperaturas ambientes e de parede de cilindro extremas na ocorrência do *knock* para condições de *knock* moderado (Autor, 2017).



Figura 4.20: Influência das temperaturas ambientes e de parede de cilindro extremas na ocorrência do *knock* para condições de não *knock* (Autor, 2017).

A sobreposição dos efeitos de temperaturas ambiente e de parede de cilindro provocam alterações significativas no valor de KIM, trabalhando mais próximos da condição de *knock* para condições mais quentes que a ambiente. Entretanto os efeitos não são suficientes para fazer o motor detonar na configuração de não *knock* além de também serem não suficientes para o motor não detonar na configuração de não *knock*.

#### 4.3.2 Influência da octanagem

As figuras (4.21) e (4.22) mostram a influência da octanagem na ocorrência do *knock* para os dois casos. O combustível utilizado na parte experimental do trabalho foi o etanol hidratado com 5% de água em massa (E95h) cujo octanagem RON é 109. São considerados casos com octanagem mais alta com valores de 110, 115 e 120 e casos com valores mais baixos com valores de 105, 100, 95, 90, 85 e 80.



Figura 4.21: Influência da octanagem na ocorrência do *knock* para condições de *knock* moderado (Autor, 2017).



Figura 4.22: Influência da octanagem na ocorrência do knock para condições de não knock (Autor, 2017).

O fator octanagem, como a própria definição do termo já explica, possui influência significativa na ocorrência do *knock*.

Para a condição de *knock* moderado, usar um combustível com octanagem de valor 6% maior do que o experimental, acima 115, é suficiente para inibir a ocorrência deste fenômeno.

Para a condição de não *knock*, usar combustível com octanagem de valor 13% menor do que o experimental, abaixo de 90 é suficiente para a ocorrência da detonação.

Assim, uma alternativa para mitigar a detonação é utilizar um combustível com octanagem mais alta o que implica em um combustível mais caro.

4.3.3 Influência da umidade relativa

As figuras (4.23) e (4.24) mostram a influência da umidade relativa na ocorrência do *knock*. Os ensaios experimentais foram realizados em um dia de umidade relativa de 29,557%. A simulação levou em consideração umidades relativas de 10%, 20%, 40% e 50%.



Figura 4.23: Influência da umidade relativa na ocorrência do *knock* para condições de *knock* moderado (Autor, 2017).



Figura 4.24: Influência da umidade relativa na ocorrência do *knock* para condições de não *knock* (Autor, 2017).

Umidade relativa influencia na ocorrência da detonação devido ao alto valor de calor específico da água mas é um fator com pouco peso no valor de KIM.

Com uma variação de 66,7% no valor da umidade relativa experimental, segue a mesma relevância dos efeitos da temperatura ambiente e de parede de cilindro, e então não é suficiente para tirar o motor da condição de detonação para a configuração de *knock* moderado e também não é suficiente para fazer o motor detonar na configuração de não *knock*.

#### 4.3.4 Influência do Avanço

As figuras (4.25) e (4.26) mostram a influência do avanço na ocorrência do *knock*. Cada rotação tem um valor de avanço diferente conforme consta nos anexos A e B e a influência do avanço é analisada considerando 5º antes e 5º depois do experimental.



Figura 4.25: Influência do avanço aumentando um grau na ocorrência do *knock* para condições de *knock* moderado (Autor, 2017).



Figura 4.26: Influência do avanço diminuindo um grau na ocorrência do *knock* para condições de não *knock* (Autor, 2017).

O avanço possui grande influência na ocorrência da detonação. Essa influência pode ser usada como ferramenta para evitar a detonação utilizando o melhor torque possível, de acordo com o melhor ponto para disparar a centelha.

Na condição de *knock* moderado é observado que uma variação na ordem de mais 3º no avanço seria suficiente para tirar o motor da condição de detonação, enquanto que é possível aumentar em até 5º no avanço para atingir a condição de não *knock* sem que haja a ocorrência da detonação.

Esta liberdade na variação do avanço na condição de *knock* limitar permite que o motor seja ajustado para utilizar o avanço que permita o motor operar de forma mais eficiente sem detonar.

4.3.5 Influência da Taxa de compressão

A taxa de compressão do motor experimental é de 12.25. As figuras (4.27) e (4.28) mostram a influência da taxa de compressão na ocorrência da detonação, considerando valores maiores que o real: 12,5, 13, 13,5 e 14 e valores menores que o real: 11,5, 11, 10,5, 10, 9,5 e 9.



Figura 4.27: Influência da taxa de compressão na ocorrência do *knock* para condições de *knock* moderado (Autor, 2017).



Figura 4.28: Influência da taxa de compressão na ocorrência do *knock* para condições de não *knock* (Autor, 2017).

Como discutido anteriormente, a ocorrência da detonação limita o valor da taxa de compressão que um motor pode utilizar sem detonar.

Para a condição de *knock* moderado, utilizar uma taxa de compressão 6,11% menor, de 11,5, é suficiente para tirar o motor da situação de detonação.

Por outro lado, para a condição de não *knock*, utilizar uma taxa de compressão 15% maior, de 14, é suficiente para colocar o motor na situação de detonação.

A combinação entre o melhor ponto de avanço para cada taxa de compressão é um dos princípios da tecnologia de taxa de compressão variável.

# **5 CONCLUSÃO**

A partir das simulações realizadas, a metodologia para predição de detonação utilizada, *knock integral method*, mostrou resultados satisfatórios para todo o range dos dados experimentais, configurando uma metodologia eficiente e com baixo custo computacional.

A implementação do fator corretivo proposto por este trabalho contribuiu para melhores resultados de previsão do motor considerado, gerando uma curva mais homogênea conforme era esperado pelos procedimentos experimentais adotados.

A metodologia permitiu verificar a influência de alguns fatores na ocorrência de *knock*, apresentando resultados coerentes e possibilitando então estudar estratégias para mitigar o efeito.

Por exemplo, consegue-se observar que dias mais quentes ou mais frios possuem pouca influência na ocorrência da detonação, porém, apesar de pequenas, podem ser consideradas condições suficientes em situações em que o motor opera muito próximo da condição de *knock*.

No caso da octanagem, como a própria definição já explica, possui papel relevante na ocorrência da detonação, utilizar combustíveis com octanagem maior é fundamental para a não ocorrência do *knock*.

Já no avanço a simulação mostrou que tem grande influência na ocorrência da detonação, e então passa a ser a variável mais importante para evitar o *knock*.

Por último, a simulação comprovou que a taxa de compressão é limitada pela ocorrência da detonação. Novas tecnologias de taxa de compressão variável são importantes para contornar esta limitação.

Desta forma pode-se dizer que simulações computacionais possuem papel importante no desenvolvimento de novas tecnologias para mitigar a ocorrência da detonação, a medida que é possível testar novas soluções com gasto reduzido.

### 5.1 Sugestões para trabalhos futuros

Este trabalho tem como sugestões para trabalhos futuros testar esta metodologia utilizada para motores que utilizam tecnologias como turbo e também EGR, além de outros álcoois combustíveis como metanol e butanol.

Outra sugestão é analisar a influência da qualidade da mistura ar-combustível na ocorrência da detonação.

## Referências

ANDERSON, J. E., DICICCO D. M., GINDER, J. M., KRAMER, U., LEONE, T. G., WALLINGTON, T. J. "High octane number ethanol-gasoline blendes: Quantifying the potencial benefits in the United States", Fuel, 2012.

BECCARI, S. PIPITONE, E., GENCHI, G. "Knock onset prediction of propane and their mixtures in spark ignition engines". Jornal of the Energy Institute, 2014.

BORETTI, A. "Analysys of Design of Pure Ethanol Engines", SAE Paper 2010011453, 2010.

BORGNAKKE, C., PUZINAUSKAS, P. XIAO, P. "Spark ignition engine simulation models. Technical report, Department of Mechanical Engineering and Applied Mechanics. University of Michigan, 1986.

BRECQ, G., BELLETTRE, J., TAZEROUT, M., MULLER, T. "Knock prevention of CHP engines by addition of N2 and CO2 to natural gas fuel". Appl Therm Eng 2003;23:1359-71.

BURLUKA, A. "Influence of simulated residual and NO concentrations on knock onset for PRFs and gasolines. SAE Paper, 2004.

CHEN, Y., RAINE, R. "A study on the influence of burning rate on engine knock from empirical data and simulation". Combustion and Flame. 2014.

CHEN, L., LI, T., YIN, T., ZHENG, B. "A predictive model for knock onset in sparkignition engines with cooled EGR". Energy Conversion and Management, 2015.

CUTTLER, D.H. "Photography of Combustion During Knocking Cycles in Discs and Compact Chambers. SAE PAPER 880195, 1988.

DOUAUD, A. M., EYZAAT, P. "Four-octane-number method for predicting the anti knock behavior of fuels and engine. SAE Paper 780080, 1978.

DUTRA, K. H. "Motores de combustão interna". Universidade Regional do Noroeste do Estado do Rio Grande do Sul, 2010.

FERNANDEZ, B. O. "Considerações sobre outros empregos do sensor de detonação para o controle eletrônico de motores ciclo otto utilizando análise espectral". Dissertação de Mestrado – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Carlos, 2006.

FERGUSON, C. R. "Internal Combustion Engines: Applied Thermosciences", 3ed, 2015.

GALLONI, E. "Dynamic Knock detection and quantification in a spark ignition engine by means of a pressure based method". Energy Conversion and Management, 2012.

GANESTAM, P. "Empirical Knock Model for Automatic Engine Calibration", Master thesis – Department of Automatic Control, Lund University, Sweden, 2010.

HERNANDEZ, J. J., LAPUERTA, M., ARGENT, J. S. "Autoignition prediction capability of Livengood-Wu correlation applied to fuels of commercial interest", International Journal of Engine Research, 2014.

HEYWOOD, J. "Internal Combustion Engine Fundamentals". McGraw-Hill, 1998.

HORNER, T. G. "Engine Knock detection using spectral analysis techniques with a TMS320 DSP. Texas Instruments Application Report SPRA039, 1995.

HOSSEINI, S., ABDOLAH, R., KHANI, A. "Proceedings of the World Congress on Engineering, vol. II, 2008.

INSTITUTO MAUÁ DE TECNOLOGIA. "Ensaios de performance para um motor utilizando Etanol hidrado (E95h) e gasoline (E27)", realizado em 11/05/2016.

KONIG, G., SHEPPARD, C. G. W. "End Gas Autoignition and Knock in a Spark Ignition Engine, SAE PAPER 902135, 1990.

JOHANSSON, B. "Forbranningsmotorns Grunder". Department of Energy Scienses, Lund University, Sweden, 2006.

LASOCKI, J. "Engine Knock Detection and evaluation: A review". Proceedings of the Institute of Vehicles 5, 2016.

LIANG, L., REITZ, R. D., IYER, C. O., YI, J. "Modeling knock in spark-ignition engines using G-equation combustion model incorporating detailed chemical kinetics. SAE PAPER 2007010165, 2007.

LIVENGOOD, J. C., WU, P. C. "Correlation of Autoignition Phenomenon in Internal Combustion Engines and Rapid Compression Machines". 5th Symposion of Combustion, 1955.

MANAVELLA, H. J. "Emissões Automotivas: Sistemas de controle e diagnostico". 2014.

McKenzie, J. E. "The Autoignition Characteristics of Turbocharged Spark Ignition Engines with Exhaust Gas Recirculation", Philosophy Doctor thesis, Mechanical Enginnering Department, Massachusetts Institute of Technology, United States of America, 2015.

MEDINA, A., CURTO, P. L., HERNANDEZ, A. C., VARGAS, L. G., BROWN, F. A., SEN, A. K. "Quasi-Dimensional Simulation of Spark Ignition Engines: From Thermodynamic Optimization to Cylindric Variability". 1st Ed, 2014.

OBERT, E. F. "Internal Combustion Engines and Air Pollution, Intext Educational Publishers, 1973.

PAN, J., ZHAO, P., LAW, C. K., WEI, H. "A predictive Livengood-Wu correlation for two-stage ignition" International Journal of Engine Research, 2015.

QI, Y., WANG, Z., WANG, J., HE, X. "Effects of thermodynamic condition on the end gas combustion mode associated with engine knock". Combustion and Flame, 2015.

RAMOS, J. I. "Internal Combustion Engine Modeling". 1989.

SANCHES, A. G. "Identificação e quantificação do fenômeno de detonação em motores de combustão interna utilizando analise espectral". Dissertação de Mestrado – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Carlos, 2002.

SILEGHEM, L. "A quase dimensional model for SI engines fueled with gasoline-alcohol blends: Knock modeling". Fuel, 2014.

SILVA, R. L. "Caracterização do sinal do fenômeno de detonação utilizando filtros adaptativos e estimador de potência". Dissertação de mestrado – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2014.

SINDIPEÇAS. "Relatório anual sobre a frota circulante no Brasil", 2017.

SOYLU, S. "Autoignition modeling of natural gas for engine modeling programs: an experimental and modeling study", Philosophy Doctor Thesis, Mechanical Enginnering Department, Iowa Stater University, United States of America, 2001.

SPICHER, U., KROGER, H. "Detection of Knocking Combustion Using Simultaneously High Speed Schieleren Cinematography and Multi Optical Fiber Technique, SAE PAPER 912312, 1991.

STRUCHTRUP, H. "Thermodynamics and Energy Conversion" 1st Ed., Springer, 2014.

SUBBARAO, P. M. V. "Analysis & Control of Knock in SI Engines: Measures to avoid uncontrollable Combustion", Mechanical Engineering Department, Indian Institute of Technology, Delhi, 2016.

TAYLOR, C. "The internal Combustion Engine in Theory and Practice", M.I.T Press, Cambridge, 1985.

TOPINKA, J. A. "Knock Behavior of a Lean-Burn, Hydrogen-Enhanced Engine Concept", Master thesis, Massachusetts Institute of Technology, United States of America, 2003.

TURNS, S. R. "An Introduction to Combustion: Concepts and applications", 3nd Ed, 2013.

WANG, Z., LI, F., WANG, Y. "A generalized kinetic model with variable octane number for engine knock prediction" Fuel, 188, 2016.

WARNATZ, J. "Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation", 4th Ed, 2006.

WEISSINGER, F. F. "Detonação: Danos e Detecção", SPA-Turbo, 2015.
WESTBROOK, C. K. "Computer modeling of engine knock chemistry". Lawrence Livermore National Laboratory. Livermore, 2006.

YATES A, D, B. "Insights relating to the autoignition characteristics of alchohol fuels". Fuel 89:83-93, 2010.

ZHEN, X., WANG, Y., XU, S., ZHU. Y., TAO, C., SONG, M. "The engine knock analysis – An overview", Applied Energy, 2011.

ZHU, G., HASKARA, I., WINKELMAN, J. "Closed-Loop ignition timing control for SI engines using ionization current feedback". IEEE Transactions On Control System Technology, 2007.

E95h												
Rotação [rpm]	T. Ambiente [°C]	UR [%]	P. Coletor de admissão	P. Coletor de escape	T. Coletor de escape [ºC]	Avanço	Atraso	Duração				
1000	24,4147663	25,15728	-0,903597653	1,904233647	466,8878284	-23,927	5,527	25,6				
1100	24,16892331	25,89286	-0,976765615	2,15525384	482,2252945	-28,827	6,427	25,4				
1200	23,59239133	28,69051	-1,08806863	2,194438107	498,7613064	-25,427	7,027	25,6				
1300	23,27637252	32,70726	-0,997384107	2,37832123	515,4018745	-27,627	6,827	26				
1400	23,14105441	30,00046	-0,89378845	2,644842233	527,1776302	-28,727	7,327	27,2				
1500	23,22444281	30,01109	-0,950541167	2,79497795	541,4663668	-28,727	8,127	27,4				
1600	23,45209084	30,67897	-1,083363623	3,24070522	562,0774378	-25,727	8,127	29,6				
1700	24,46903876	30,52125	-1,140767347	3,296308217	575,6524125	-24,527	8,527	31,2				
1800	24,68251765	29,85465	-1,082813693	3,420523277	577,9064871	-28,327	8,327	30,6				
1900	24,72685644	29,00472	-1,096475333	3,779440963	584,8251952	-29,427	8,227	31				
2000	24,54956266	27,54123	-1,099525937	4,062327233	589,5069603	-32,327	8,727	30,4				
2200	24,76713371	26,92783	-1,19101295	4,88100603	605,9135185	-34,127	9,527	31				
2400	24,5373373	27,003	-1,317129717	5,06793762	610,1234974	-37,927	10,927	30,2				
2600	24,68006233	30,09441	-1,68296728	6,111458823	628,2633823	-33,727	10,327	31,6				
2800	24,8687938	28,23599	-2,116467147	7,65315964	654,4083665	-29,127	8,727	29,4				
3000	25,06097279	29,557	-2,483105333	9,278515983	680,1229261	-25,827	8,827	32				

# ANEXO A – Condições de operação do motor para a condição de *Knock* Moderado

Unidades:

Pressão no coletor de admissão – kPa

Pressão no coletor de escape – kPa

Avanço, Atraso e Duração da Combustão – Graus de Virabrequim usando como referência o PMS.

E95h												
Rotação [rpm]	T. Ambiente [°C]	UR [%]	P. Coletor de admissão	P. Coletor de escape	T. Coletor de escape [°C]	Avanço	Atraso	Duração				
1000	24,37835609	25,61574042	-0,90479938	1,992361943	482,686715	15,027	6,027	27,6				
1100	23,96521966	26,00202789	-1,033968297	2,196064937	495,5610598	18,727	6,527	25,8				
1200	23,31641451	29,35001297	-1,26162789	2,28317768	498,6253534	21,327	6,927	27				
1300	23,31332493	29,06885899	-0,998935877	2,4310771	532,3498786	16,427	7,227	30,2				
1400	23,37163854	31,24882156	-0,92932159	2,59767727	541,1311337	18,627	7,827	31,2				
1500	23,2500496	28,99729938	-0,976164507	2,85301957	554,3136476	19,327	8,727	31,4				
1600	23,88656798	26,909444	-1,086866263	3,249447177	570,7684015	20,827	9,027	32,4				
1700	24,48968375	26,42991491	-1,133310713	3,39114545	578,8668577	22,627	8,627	32,8				
1800	24,65804639	26,47724996	-1,01590163	3,624123103	583,5922185	24,127	8,927	32,6				
1900	24,48345343	27,40250344	-1,101430077	3,79478948	589,3981045	24,527	8,927	34				
2000	24,40091429	28,20560561	-1,108584223	4,154624617	597,5037929	24,827	9,027	34,4				
2200	24,66158614	27,26457375	-1,21198286	4,888528423	609,4628635	28,527	9,527	34				

# ANEXO B – Condições de operação do motor para a condição de não Knock

Unidades:

Pressão no coletor de admissão – kPa

Pressão no coletor de escape – kPa

Avanço, Atraso e Duração da Combustão – Graus de Virabrequim usando como referência o PMS.

## ANEXO C – Código em MatLab do Simulador termodinâmico utilizado

%% Simulador termodinâmico de um motor ICE 4 tempos

```
oʻs______
____
clear all
close all
clc
8-----
%% Características da simulação:
global Programa
% Combustível:-----
% EOH - Etanol
% G - Gasolina
  Programa.combustivel = sprintf('EOH');
8
  Programa.combustivel = sprintf('G');
§_____
                              _____
____
%% Condições ambientes
global Ambiente
global Padm
global Pesc
global Tesc
Ambiente.P0 = 93.353525*1e3;
Ambiente.T0 = 24.6615 + 273;
Ambiente.UR = 0.2726;
Padm = Ambiente.P0 - 1.2119*1e3;
Pesc = Ambiente.P0 + 4.8885*1e3;
Tesc = 609.4628 + 273;
%% Características do motor:
% Características geométricas:-----
% Obs.: usar todas unidades em SI
Dados motor EB2
%% Parâmetros a serem inseridos:
global tetacomb
global angic
```

```
Calibracao.N = 2200;
Calibracao.avanco = -23.527
                                   % Rotação em rpm
                                       % Avanço (Referência: PMS da
compressão)
Calibracao.atraso = 10.727;
                                         % Atraso de ignição
tetacomb = 34;
                                    % Duração da combustão
angic = Calibracao.avanco + Calibracao.atraso + 360;
%% Dados da equação de arrhenius:
global A t
global B t
global n t
switch Programa.combustivel
   case 'EOH'
ON = 109;
   case 'G'
ON = 90;
end
A t = 17.13 \times (ON/100) \wedge (3.402);
B t = 3400;
n^{-}t = 1.70;
%% Solver:
addpath('Subrotinas')
Polinomio;
Resultados = Solver(Motor, Calibracao);
global n
disp('Consumo de Combustível:')
disp(Resultados.CAC)
disp('Valor final da integral:')
disp(Resultados.detonacao)
%% Caracterização do motor:
% Unidades em SI!
%% Variáveis de calibração:
Calibracao.T camisa = 520; % Temperatura da parede do
cilindro
Calibracao.carga = 1;
                                   % Pressão no coletor de admissão
                                   % Razão ar-combustível relativa
Calibracao.lambda = 1;
%% Dados de coletores
global Tadm
global Ambiente
Tadm = Ambiente.T0;
%% Geometria:
Motor.TC = 12.25;
                                       % Taxa de compressão
```

```
Motor.l = 145.6e-3;
Motor.e = 0.0069:
                                       % Comprimento da biela
Motor.e = 0.0069;
                                        % Excentricidade pistão-
virabrequim
% As informações a seguir podem apresentar redundância dependendo da
% informação que o usuário tem disponível:
Motor.d = 75e-3;
                                        % Diâmetro do cilindro
Motor.Ld = 90.473/75;
Motor.Vc = 400e-6;
                                        % Razão L∕D
Motor.Vc = 400e-6;
                                        % Volume de um cilindro
% Motor.L = 80e-3;
                                        % Curso do pistão
% Motor.d = (Motor.Vc*4/(Motor.Ld*pi))^(1/3);
Motor.L = Motor.Vc*4/(pi*Motor.d^2);
% Motor.L = Ld*d;
%% Comando de válvulas:
Motor.valvulas = 4;
% Novamente podem haver redundâncias, verificar informações
disponíveis
% Referência: PMS das fases abertas
% Admissão:
Motor.dva = 30.93e-3;
Motor.tetava = 232;
                                        % Diâmetro da válvula
                                   % Tempo de abertura
% Relação abertura máxima/diâmetro
% IVO - abertura
Motor.YDmaxva = 8.1/30.93;
Motor.angieva = 28;
Motor.angfeva = Motor.angieva + Motor.tetava;
% Escape:
Motor.dve = 28.27e-3; % Diâmetro da válvula
Motor.tetave = 230; % Tempo de abertura
Motor.YDmaxve = 7.8/28.27; % Relação abertura máxima/diâmetro
Motor.angfeve = 48; % EVC - fechamento
Motor.angfeve = 48;
                                        % EVC - fechamento
Motor.angieve = Motor.angfeve - Motor.tetave;
%% Determinação da cinemática do motor:
function Dados saida = Cinematica(Motor, Calibracao)
global teta
N = Calibracao.N;
d = Motor.d;
L = Motor.L;
l = Motor.l;
e = Motor.e;
Vc = Motor.Vc;
TC = Motor.TC;
```

```
% Características cinemáticas:
vp = 2*L*N/60;
Ac = (pi*d^2)/4;
Vmc = Vc/(TC - 1);
Amc = pi*d*(L/(TC-1)) + Ac;
w = 2*pi*N/60;
% Determinação do PMS:
teta eq = -pi/10;
criterio teta = 1;
if e~=0
while abs(criterio teta)>abs(teta_eq/1000)
    teta aux = teta eq;
    teta_eq = atan((-((L/2)*sin(teta_eq)-e)/l)/sqrt(1 - 
(((L/2)*sin(teta_eq) - e)/l)^2));
    criterio teta = teta aux - teta eq;
end
gama eq = asin(((L/2) * sin(teta eq) - e)/1);
L \max = (L/2) \cos(teta eq) + 1\cos(gama eq);
else
    teta eq = 0;
    L max = L/2+1;
end
% Posição, Área, Volume e taxa de variação do volume:
% Posição:
gama = asin(((L/2)*sin(teta-teta eq) - e)/1);
D = L_{max} - (L/2) \cos(teta-teta_eq) - 1\cos(gama);
dD = (L/2) * sin(teta-teta eq) + (((L/2) * sin(teta-teta eq) -
e)*(L/2).*cos(teta-teta eq))./(l*cos(gama));
A=Amc+Ac+d.*D*pi;
% Área do cilindro
V=((Vmc)+(Ac.*D));
% Volume do cilíndro
dV=((Ac.*dD));
% Diferencial de volume
Dados saida.D = D;
Dados saida.V = V;
Dados saida.A = A;
Dados saida.dV = dV;
Dados saida.w = w;
Dados saida.vp = vp;
end
%% Determinação de área e coeficiente de descarga das válvulas
function [CAve, CAva] = Comando de valvulas(Motor)
global n
```

```
% Assumindo perfil parabólico com acelerações constantes
tetave = Motor.tetave;
tetava = Motor.tetava;
angieva = Motor.angieva;
angfeva = Motor.angfeva;
angieve = Motor.angieve;
angfeve = Motor.angfeve;
YDmaxva = Motor.YDmaxva;
YDmaxve = Motor.YDmaxve;
dva = Motor.dva;
dve = Motor.dve;
fator = Motor.valvulas/2;
% Coeficientes para determinação do coeficiente de descarga:
B0 = 9.999876e - 1;
B1 = 7.633573e-1;
B2 = -4.089484e2;
B3 = 1.885862e4;
B4 = -4.016319e5;
B5 = 4.720187e6;
B6 = -3.295265e7;
B7 = 1.401485e8;
B8 = -3.567916e8;
B9 = 5.004e8;
B10 = -2.977371e8;
%% Válvula de escape
% Parâmetros do perfil de elevação:
r = -4;
M = 2*(1-r);
Inf1 = tetave/M;
a1 = 4*YDmaxve*(1-r)/(tetave*n)^{2};
b1 = 0;
c1 = 0;
eve p(1:round(Inf1)*n) = a1*(1:round(Inf1)*n).^2 +
b1*(1:round(Inf1)*n)+c1;
Inf2 = (M-1)/M*tetave;
a2 = a1/r;
b2 = -a2*(tetave*n);
c2 = a2*((tetave*n)^2)/(4*(1-r));
eve p(round(Inf1)*n+1:round(Inf2)*n) =
a2*(round(Inf1)*n+1:round(Inf2)*n).^2 +
b2*(round(Inf1)*n+1:round(Inf2)*n)+c2;
a3 = r*a2;
b3 = -2*a3*(tetave*n);
c3 = a3*(tetave*n)^{2};
eve p(round(Inf2)*n+1:tetave*n) = a3*(round(Inf2)*n+1:tetave*n).^2 +
b3*(round(Inf2)*n+1:tetave*n)+c3;
```

```
Cde = 0.98*(B0 + B1*eve p + B2*eve p.^2 + B3*eve p.^3 + B4*eve p.^4 +
B5*eve p.^5 ...
    + B6*eve_p.^6 + B7*eve_p.^7 + B8*eve_p.^8 + B9*eve_p.^9 +
B10*eve p.^10);
for i=1:tetave*n
    if eve p(i) <= 0.125
        CAve p(i) =
fator*Cde(i) *pi*cos(pi/4)*(eve p(i)*dve)*(dve+(eve p(i)*dve)/2);
    elseif eve p(i) <= 0.274049
        CAve p(i) = fator*Cde(i)*(17/16)*pi*dve*((eve p(i)*dve)^2-
(eve p(i)*dve)*dve/8+(dve^2)/128)^(1/2);
    else
        CAve p(i) = fator*Cde(i)*15*pi*(dve^2)/64;
    end
end
%% Válvula de admissão
% Parâmetros do perfil de elevação:
r = -6;
M = 2*(1-r);
Inf1 = tetava/M;
a1 = 4*YDmaxva*(1-r)/(tetava*n)^{2};
b1 = 0;
c1 = 0;
eva p(1:round(Inf1)*n) = a1*(1:round(Inf1)*n).^2 +
b1*(1:round(Inf1)*n)+c1;
Inf2 = (M-1)/M*tetava;
a2 = a1/r;
b2 = -a2*(tetava*n);
c2 = a2*((tetava*n)^2)/(4*(1-r));
eva p(round(Inf1)*n+1:round(Inf2)*n) =
a2*(round(Inf1)*n+1:round(Inf2)*n).^2 +
b2*(round(Inf1)*n+1:round(Inf2)*n)+c2;
a3 = r*a2;
b3 = -2*a3*(tetava*n);
c3 = a3*(tetava*n)^{2};
eva p(round(Inf2)*n+1:tetava*n) = a3*(round(Inf2)*n+1:tetava*n).^2 +
b3*(round(Inf2)*n+1:tetava*n)+c3;
Cda = (B0 + B1*eva p + B2*eva p.^2 + B3*eva p.^3 + B4*eva p.^4 +
B5*eva p.^5 ...
    + B6*eva p.^6 + B7*eva p.^7 + B8*eva p.^8 + B9*eva p.^9 +
B10*eva p.^10);
for i=1:tetava*n
    if eva p(i) <= 0.125
        CAva p(i) =
fator*Cda(i)*pi*cos(pi/4)*(eva p(i)*dva)*(dva+(eva p(i)*dva)/2);
    elseif eva p(i) <= 0.274049
```

```
CAva p(i) = fator*Cda(i)*(17/16)*pi*dva*((eva p(i)*dva)^2-
 (eva p(i)*dva)*dva/8+(dva^2)/128)^(1/2);
           else
                     CAva p(i) = fator*Cda(i)*15*pi*(dva^2)/64;
          end
end
%% Alocação dos vetores na posição correta
if angfeve>0
        CAve((angieve+720)*n:720*n+1) = CAve p(1:(720*n+1-720)*n+1) = CA
 (angieve+720)*n)+1);
        CAve(1:angfeve*n) = CAve p((720*n+1-(angieve+720)*n):tetave*n);
else
        CAve((angieve+720)*n+1:(angfeve+720)*n) = CAve p;
        CAve((angfeve+720)*n+1:720*n+1) = 0;
end
if angieva<0</pre>
          CAva((angieva+720)*n:720*n+1) = CAva p(1:(720*n+1-
 (angieva+720)*n)+1);
          CAva(1:angfeva*n) = CAva p((720*n+1-(angieva+720)*n):tetava*n);
else
           CAva(angieva*n+1:angfeva*n) = CAva p;
           CAva(angfeva*n+1:720*n+1) = 0;
end
end
function [y comb, M comb, PCI] = Combustivel(Calibracao)
global Programa
global Composicao
global Ambiente
P0 = Ambiente.P0;
T0 = Ambiente.T0;
UR = Ambiente.UR;
lambda = Calibracao.lambda;
switch Programa.combustivel
          case 'EOH'
                     rho H2O = 1000;
                     rho EOH = 0.785*rho H2O;
                     M H2O=18e-3;
                     M_etanol= 46e-3;
                     x = 0.05;
                     y = 1/(1 - (rho EOH/rho H2O)*((x = agua-1)/x = agua));
                     y etanol = 1-y agua;
                     PCI = 2.75918165e7*(1-y_agua);
                     n agua = 1/(1 - (M \text{ etanol}/M_H2O) * ((y_agua-1)/y_agua));
                     n etanol=1-n agua;
                     n C = 2*n etanol;
                     n H = 6*n etanol+2*n agua;
                     n_0 = 1*n_etanol+1*n_agua;
```

```
M comb = M H2O*n agua+M etanol*n etanol;
   case 'G'
       rho H2O = 1000;
        rho EOH = 0.785*rho H2O;
        rho Gasolina = 0.75 rho H2O;
       M etanol= 46e-3;
       M gasolina=101.136e-3;
        x etanol = 0;
        y_etanol = 1/(1 - (rho_Gasolina/rho EOH)*((x etanol-
1)/x_etanol));
        n_etanol = 1/(1 - (M_etanol/M_gasolina)*((y_etanol-
1)/y_etanol));
        n_gasolina=1-n_etanol;
        n_C = 7*n_gasolina + 2*n_etanol;
       n_H = 17*n_gasolina + 6*n_etanol;
       n O = n etanol;
       M_comb = M_gasolina*n_gasolina + M_etanol*n_etanol;
        PCI etanol = 2.75918165e7;
        PCI_gasolina = 44000e3;
        PCI = PCI_gasolina*(1-y_etanol) + PCI_etanol*y_etanol;
```

```
end
```

```
yas N2 = 0.78084;
yas O2 = 0.20946;
yas Arg = 0.00937;
yas CO2 = 0.00033;
a = 5.11564;
b = 1687.53;
c = 230.17;
T AMB = T0 - 273;
P AMB = P0 * 1e - 3;
P SAT = (10^{(a-(b/(T AMB + c))))*10^{2};
P parcialH2O = P SAT*UR;
n_H2Oar = (P_parcialH2O/P_AMB);
n_{AU} = 1 + n_{H2Oar};
ya H2Oar = n H2Oar/n AU;
ya N2 = (1-ya H2Oar)*yas N2;
ya O2 = (1-ya H2Oar)*yas O2;
ya_Arg = (1-ya_H2Oar) *yas_Arg;
ya_CO2 = (1-ya_H2Oar) * yas_CO2;
as = (n C + n H/4 - n O/2)/ya O2;
a = lambda*as;
Nrt = a + 1;
y comb = 1/Nrt;
y ar = a/Nrt;
y_N2 = y_ar*ya_N2;
y_{02} = y_{ar*ya_{02}};
y_H2Oar = y_ar*ya_H2Oar;
y_Arg = y_ar*ya_Arg;
```

```
y_{CO2} = y_{ar*ya_CO2};
    y_C = y_comb*n_C;
    y_0 = y_comb*n_0;
    y_H = y_comb*n_H;
if lambda == 1
    n_Arg = y_Arg;
    n_{CO2} = y_{C} + y_{CO2};
    n CO = 0;
    n_{H2} = 0;
    n_{H20} = y_{H/2} + y_{H20ar};
    n_{02} = 0;
    n_{N2} = y_{N2};
    Ntp = n_{Arg} + n_{CO2} + n_{CO} + n_{H2} + n_{H2O} + n_{O2} + n_{N2};
    yp_Arg = n_Arg/Ntp;
    yp_CO = 0;
    yp_CO2 = n_CO2/Ntp;
    yp_H = 0;
    yp_{H2} = 0;
    yp_{H20} = n_{H20}/Ntp;
    ур_ОН = 0;
    yp_0 = 0;
    yp_{02} = 0;
    yp_N = 0;
    yp_N2 = n_N2/Ntp;
    yp_NO = 0;
    yp_NO2 = 0;
elseif lambda<1</pre>
    n H2 = (2*y C + y H/2 - y O - 2*y O2)/1.1276595;
    n_Arg = y_Arg;
    n^{-}CO = n H^{2}/0.47;
    n_{CO2} = y_{C} - n_{CO} + y_{CO2};
    n_{H20} = y_{H/2} - n_{H2} + y_{H20ar};
    n 02 = 0;
    n_{N2} = y_{N2};
    Ntp = n_Arg + n_CO2 + n_CO + n_H2 + n_H2O + n_O2 + n_N2;
    yp_Arg = n_Arg/Ntp;
    yp CO = n CO/Ntp;
    yp CO2 = n CO2/Ntp;
    yp_H = 0;
    ypH2 = n H2/Ntp;
    yp_{H20} = n_{H20}/Ntp;
    yp_OH = 0;
    yp 0 = 0;
    yp_02 = 0;
    yp_N = 0;
    yp N2 = n N2/Ntp;
    yp NO = 0;
    yp NO2 = 0;
elseif lambda>1
```

```
n_Arg = y_Arg;
    n_{CO2} = y_{C} + y_{CO2};
    n_{CO} = 0;
    n_{H2} = 0;
    n_{H20} = y_{H/2} + y_{H20ar};
    n_{02} = y_{02} + y_{0/2} - y_{C} - y_{H/4};
    n_{N2} = y_{N2};
    Ntp = n Arg + n CO2 + n CO + n H2 + n H2O + n O2 + n N2;
    yp_Arg = n_Arg/Ntp;
    yp_CO = 0;
    yp_CO2 = n_CO2/Ntp;
    yp_H = 0;
    yp_{H2} = 0;
    yp_H2O = n_H2O/Ntp;
    ур_ОН = 0;
    yp_0 = 0;
    yp_{02} = n_{02}/Ntp;
    yp_N = 0;
    yp N2 = n N2/Ntp;
    yp_NO = 0;
    yp_NO2 = 0;
end
    Composicao.y_N2 = y_N2;
    Composicao.y_02 = y_0^2;
    Composicao.y_CO2 = y_CO2;
    Composicao.y_Arg = y_Arg;
    Composicao.y_H2Oar = y_H2Oar;
    Composicao.y_comb = y_comb;
    Composicao.y_C = y_C;
    Composicao.y_0 = y_0;
    Composicao.y H = y H;
    Composicao.n etanol = n etanol;
    Composicao.M comb = M comb;
    Composicao.yp CO2 = yp CO2;
    Composicao.yp_H2O = yp_H2O;
    Composicao.yp_N2 = yp_N2;
    Composicao.yp_Arg = yp_Arg;
    Composicao.yp_CO = yp_CO;
    Composicao.yp_H2 = yp_H2;
    Composicao.yp_O2 = yp_O2;
    Composicao.yp_O = yp_O;
    Composicao.yp_N = yp_N;
    Composicao.yp_H = yp_H;
    Composicao.yp_NO = yp_NO;
    Composicao.yp_NO2 = yp_NO2;
```

Composicao.ygr\_CO2 = yp\_CO2; Composicao.ygr\_H2O = yp\_H2O; Composicao.ygr\_N2 = yp\_N2; Composicao.ygr\_Arg = yp\_Arg; Composicao.ygr\_CO = yp\_CO; Composicao.ygr\_H2 = yp\_H2; Composicao.ygr\_O2 = yp\_O2;

Composicao.yp\_OH = yp\_OH;

```
Composicao.ygr_O = yp_O;
Composicao.ygr_N = yp_N;
Composicao.ygr_H = yp_H;
Composicao.ygr_NO = yp_NO;
Composicao.ygr_NO2 = yp_NO2;
Composicao.ygr_OH = yp_OH;
```

end

```
function Saida = FA(Cinematica,Calibracao,Motor,CAe,CAa,Entradas,d)
global n
global dteta
global R
global Barra
global Composicao
vp = Cinematica.vp;
V = Cinematica.V;
dV = Cinematica.dV;
A = Cinematica.A;
w = Cinematica.w;
T camisa = Calibracao.T camisa;
P = Entradas.P;
T = Entradas.T;
m = Entradas.m;
FGR = Entradas.FGR;
Fracoes = Entradas.composicao;
angieve = Motor.angieve+720;
angfeve = Motor.angfeve;
angfeva = Motor.angfeva;
if angfeve<0</pre>
    angfeve = angfeve+720;
end
angieva = Motor.angieva;
if angieva<0</pre>
    angieva = angieva+720;
end
m bf(angieve*n) = 0;
criterio h esc = 0;
criterio_h_adm = 0;
for i = angieve*n:720*n
[R_reag,Cv_reag,dCv_reag,Cp_reag] = Propriedades('r',T(i));
[R_prod,Cv_prod,dCv_prod,Cp_prod] = Propriedades('gr',T(i));
Cv mist = FGR(i)*Cv prod + (1-FGR(i))*Cv reag;
dCv mist = FGR(i) * dCv prod + (1-FGR(i)) * dCv reag;
Cp_mist = FGR(i)*Cp_prod + (1-FGR(i))*Cp_reag;
M prod = R/R prod;
M reag = R/R reag;
n res = m(i) *FGR(i) *M prod;
n_{reag} = m(i) * (1-FGR(i)) * M_{reag};
```

```
FMGR = n res/(n res+n reag);
M mist = M reag*(1-FMGR) + M prod*FMGR;
Gas.Cp = Cp_mist;
Gas.Cv = Cv_mist;
Gas.R = R/M mist;
Gas.BF = m bf(i);
[dma,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm = dma + dme;
if CAa(i) == 0
h HO = 130*(V(i)^{(-0.06)})*((P(i)^{(-5)^{(0.8)}})*(T(i)^{(-6)})
0.4))*(vp+1.4)^0.8;
h NE = 82.3*(d^{-0.422})*((vp*P(i)*1e-5)^{0.578})*(T(i)^{-0.199}));
if CAe(i)/(max(CAe))<1 && criterio_h_esc == 0</pre>
   h = h NE*CAe(i) / (max(CAe)) + h HO*(1-CAe(i) / (max(CAe)));
else
   h = h NE;
    criterio_h_esc = 1;
end
elseif CAe(i) == 0
h HO = 130*(V(i)^(-0.06))*((P(i)*1e-5)^0.8)*(T(i)^(-
0.4))*(vp+1.4)^0.8;
h NA = 679*(d^{(-0.193)})*((vp*P(i)*1e-5)^{0.807})*(T(i)^{(-0.534)});
if CAa(i)/(max(CAa))<1 && criterio h adm == 0</pre>
   h = h NA;
elseif CAa(i)/(max(CAa))==1
   h = h NA;
    criterio h adm = 1;
else
    h = h NA*CAa(i)/(max(CAa)) + h HO*(1-CAa(i)/(max(CAa)));
end
else
h NE = 82.3*(d^{(-0.422)})*((vp*P(i)*1e-5)^{0.578})*(T(i)^{(-0.199)});
h NA = 679*(d^{(-0.193)})*((vp*P(i)*1e-5)^{0.807})*(T(i)^{(-0.534)});
h = (h NE^{*}(1 - CAa(i))/CAa(angfeve^{*}n) +
(CAe(i)/CAe(angieva*n)))+h NA*(CAa(i)/CAa(angfeve*n) + (1-
CAe(i)/CAe(angieva*n))))/2;
end
% Solver (RK-5):
88888
dT = (-h*A(i)*(T(i) - T camisa)/w - P(i)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i))*dme + (Cpa*Tma -
Cv_mist*T(i))*dma)/(m(i)*(Cv_mist+dCv_mist));
dP = P(i) * ((1/m(i)) * dm + (1/T(i)) * dT - (1/V(i)) * dV(i));
T(i+1) = T(i) + dT*dteta/4;
P(i+1) = P(i) + dP*dteta/4;
m(i+1) = m(i) + dm*dteta/4;
[dma1,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme1,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm1 = dma1 + dme1;
```

```
dT1 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme1 + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i+1))*dma1)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP1 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm1 + (1/T(i+1))*dT1 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) + dT*dteta/8 + dT1*dteta/8;
P(i+1) = P(i) + dP*dteta/8 + dP1*dteta/8;
m(i+1) = m(i) + dm*dteta/8 + dm1*dteta/8;
[dma2,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme2,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm2 = dma2 + dme2;
dT2 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T_camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme2 + (Cpa*Tma -
Cv_mist*T(i+1))*dma2)/(m(i)*(Cv_mist+dCv_mist));
dP2 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm2 + (1/T(i+1))*dT2 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) - dT1*dteta/2 + dT2*dteta/2;
P(i+1) = P(i) - dP1*dteta/2 + dP2*dteta/2;
m(i+1) = m(i) - dm1*dteta/2 + dm2*dteta/2;
[dma3,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme3,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm3 = dma3 + dme3;
dT3 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme3 + (Cpa*Tma -
Cv_mist*T(i+1))*dma3)/(m(i)*(Cv_mist+dCv_mist));
dP3 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm3 + (1/T(i+1))*dT3 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) + 3*dT*dteta/16 + 9*dT3*dteta/16;
P(i+1) = P(i) + 3*dP*dteta/16 + 9*dP2*dteta/16;
m(i+1) = m(i) + 3*dm*dteta/16 + 9*dm3*dteta/16;
[dma4,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme4,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm4 = dma4 + dme4;
dT4 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T_camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme4 + (Cpa*Tma -
Cv_mist*T(i+1))*dma4)/(m(i)*(Cv_mist+dCv_mist));
dP4 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm4 + (1/T(i+1))*dT4 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) - 3*dT*dteta/7 + 2*dT1*dteta/7 + 12*dT2*dteta/7 -
12*dT3*dteta/7 + 8*dT4*dteta/7;
P(i+1) = P(i) - 3*dP*dteta/7 + 2*dP1*dteta/7 + 12*dP2*dteta/7 -
12*dP3*dteta/7 + 8*dP4*dteta/7;
m(i+1) = m(i) - 3*dm*dteta/7 + 2*dm1*dteta/7 + 12*dm2*dteta/7 -
12*dm3*dteta/7 + 8*dm4*dteta/7;
[dma5,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme5,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm5 = dma5 + dme5;
dT5 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme5 + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i+1))*dma5)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP5 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm5 + (1/T(i+1))*dT5 - (1/V(i))*dV(i));
```

```
T(i+1) = T(i) + (dteta/90)*(7*dT + 32*dT2 + 12*dT3 + 32*dT4 + 7*dT5);
P(i+1) = P(i) + (dteta/90)*(7*dP + 32*dP2 + 12*dP3 + 32*dP4 + 7*dP5);
m(i+1) = m(i) + (dteta/90)*(7*dm + 32*dm2 + 12*dm3 + 32*dm4 + 7*dm5);
응응응응응
fluxo massico(i) = (w/90)*(7*dm + 32*dm2 + 12*dm3 + 32*dm4 + 7*dm5);
fluxo massico esc(i) = (w/90)*(7*dme + 32*dme2 + 12*dme3 + 32*dme4 +
7*dme5);
fluxo massico adm(i) = (w/90)*(7*dma + 32*dma2 + 12*dma3 + 32*dma4 +
7*dma5);
inc massa adm = (dteta/90)*(7*dma + 32*dma2 + 12*dma3 + 32*dma4 +
7*dma5);
% Determinação da fração de gás residual
if inc massa adm>0 && m bf(i)<0</pre>
FGR(i+1) = 1 - ((1-FGR(i)) * m(i) + inc massa adm) / m(i+1);
else
FGR(i+1) = FGR(i);
end
m bf(i+1) = m bf(i) - inc massa adm;
waitbar(((i-angfeva*n)/(720*n+1)),Barra);
Fracoes.produtos(1,i) = Composicao.yp Arg;
Fracoes.produtos(2,i) = Composicao.yp CO;
Fracoes.produtos(3,i) = Composicao.yp CO2;
Fracoes.produtos(4,i) = Composicao.yp H;
Fracoes.produtos(5,i) = Composicao.yp H2;
Fracoes.produtos(6,i) = Composicao.yp H2O;
Fracoes.produtos(7,i) = Composicao.yp OH;
Fracoes.produtos(8,i) = Composicao.yp O;
Fracoes.produtos(9,i) = Composicao.yp 02;
Fracoes.produtos(10,i) = Composicao.yp N;
Fracoes.produtos(11,i) = Composicao.yp N2;
Fracoes.produtos(12,i) = Composicao.yp NO;
Fracoes.produtos(13,i) = Composicao.yp NO2;
Fracoes.residuos(1,i) = Composicao.yp Arg;
Fracoes.residuos(2,i) = Composicao.yp CO;
Fracoes.residuos(3,i) = Composicao.yp CO2;
Fracoes.residuos(4,i) = Composicao.yp H;
Fracoes.residuos(5,i) = Composicao.yp H2;
Fracoes.residuos(6,i) = Composicao.yp H2O;
Fracoes.residuos(7,i) = Composicao.yp OH;
Fracoes.residuos(8,i) = Composicao.yp 0;
Fracoes.residuos(9,i) = Composicao.yp 02;
Fracoes.residuos(10,i) = Composicao.yp N;
Fracoes.residuos(11,i) = Composicao.yp N2;
Fracoes.residuos(12,i) = Composicao.yp NO;
Fracoes.residuos(13,i) = Composicao.yp NO2;
```

```
P(1) = P(720*n+1);
T(1) = T(720*n+1);
m(1) = m(720*n+1);
FGR(1) = FGR(720*n+1);
m bf(1) = m bf(720*n+1);
for i = 1:angfeva*n
[R reag,Cv reag,dCv reag,Cp reag] = Propriedades('r',T(i));
[R prod,Cv prod,dCv prod,Cp prod] = Propriedades('gr',T(i));
Cv mist = FGR(i) *Cv prod + (1-FGR(i)) *Cv reag;
dCv_mist = FGR(i)*dCv_prod + (1-FGR(i))*dCv_reag;
Cp_mist = FGR(i)*Cp_prod + (1-FGR(i))*Cp_reag;
M prod = R/R_prod;
M_reag = R/R_reag;
n_res = m(i) *FGR(i) *M_prod;
n reag = m(i) * (1 - FGR(i)) * M reag;
FMGR = n res/(n res+n reag);
M mist = M reag*(1-FMGR) + M prod*FMGR;
Gas.Cp = Cp mist;
Gas.Cv = Cv mist;
Gas.R = R/M mist;
Gas.BF = m_bf;
[dma,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm = dma + dme;
% Coeficiente de película:
if CAa(i) == 0
h HO = 130*(V(i)^(-0.06))*((P(i)*1e-5)^0.8)*(T(i)^(-
0.4))*(vp+1.4)^0.8;
h NE = 82.3*(d^(-0.422))*((vp*P(i)*1e-5)^0.578)*(T(i)^(-0.199));
if CAe(i)/(max(CAe))<1 && criterio h esc == 0</pre>
    h = h NE*CAe(i) / (max(CAe)) + h HO*(1-CAe(i) / (max(CAe)));
else
    h = h NE;
    criterio h esc = 1;
end
elseif CAe(i) == 0
h HO = 130*(V(i)^(-0.06))*((P(i)*1e-5)^0.8)*(T(i)^(-
0.4)) * (vp+1.4) ^0.8;
h NA = 679*(d^{(-0.193)})*((vp*P(i)*1e-5)^{0.807})*(T(i)^{(-0.534)});
if CAa(i)/(max(CAa))<1 && criterio h adm == 0</pre>
    h = h NA;
elseif CAa(i)/(max(CAa))==1
    h = h NA;
    criterio_h_adm = 1;
else
    h = h NA*CAa(i) / (max(CAa)) + h HO*(1-CAa(i) / (max(CAa)));
end
else
h NE = 82.3*(d^{-0.422})*((vp*P(i)*1e-5)^{0.578})*(T(i)^{-0.199});
h NA = 679*(d^{(-0.193)})*((vp*P(i)*1e-5)^{0.807})*(T(i)^{(-0.534)});
h = (h NE*(1 - CAa(i)/CAa(angfeve*n) +
(CAe(i)/CAe(angieva*n)))+h_NA*(CAa(i)/CAa(angfeve*n) + (1-
CAe(i)/CAe(angieva*n))))/2;
end
```

```
% Solver (RK-5):
~~~~~
dT = (-h*A(i)*(T(i) - T camisa)/w - P(i)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i))*dme + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i))*dma)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP = P(i) * ((1/m(i)) * dm + (1/T(i)) * dT - (1/V(i)) * dV(i));
T(i+1) = T(i) + dT*dteta/4;
P(i+1) = P(i) + dP*dteta/4;
m(i+1) = m(i) + dm*dteta/4;
[dma1,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme1,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm1 = dma1 + dme1;
dT1 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme1 + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i+1))*dma1)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP1 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm1 + (1/T(i+1))*dT1 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) + dT*dteta/8 + dT1*dteta/8;
P(i+1) = P(i) + dP*dteta/8 + dP1*dteta/8;
m(i+1) = m(i) + dm*dteta/8 + dm1*dteta/8;
[dma2,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme2,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm2 = dma2 + dme2;
dT2 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme2 + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i+1))*dma2)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP2 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm2 + (1/T(i+1))*dT2 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) - dT1*dteta/2 + dT2*dteta/2;
P(i+1) = P(i) - dP1*dteta/2 + dP2*dteta/2;
m(i+1) = m(i) - dm1*dteta/2 + dm2*dteta/2;
[dma3,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme3,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm3 = dma3 + dme3;
dT3 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme3 + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i+1))*dma3)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP3 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm3 + (1/T(i+1))*dT3 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) + 3*dT*dteta/16 + 9*dT3*dteta/16;
P(i+1) = P(i) + 3*dP*dteta/16 + 9*dP2*dteta/16;
m(i+1) = m(i) + 3*dm*dteta/16 + 9*dm3*dteta/16;
[dma4,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme4,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm4 = dma4 + dme4;
```

```
dT4 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme4 + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i+1))*dma4)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP4 = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm4 + (1/T(i+1))*dT4 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) - 3*dT*dteta/7 + 2*dT1*dteta/7 + 12*dT2*dteta/7 -
12*dT3*dteta/7 + 8*dT4*dteta/7;
P(i+1) = P(i) - 3*dP*dteta/7 + 2*dP1*dteta/7 + 12*dP2*dteta/7 -
12*dP3*dteta/7 + 8*dP4*dteta/7;
m(i+1) = m(i) - 3*dm*dteta/7 + 2*dm1*dteta/7 + 12*dm2*dteta/7 -
12*dm3*dteta/7 + 8*dm4*dteta/7;
[dma5,Cpa,Tma] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAa(i),w,'a');
[dme5,Cpe,Tme] = Fluxo(P(i),T(i),Gas,CAe(i),w,'e');
dm5 = dma5 + dme5;
dT5 = (-h*A(i)*(T(i+1) - T_camisa)/w - P(i+1)*dV(i) + (Cpe*Tme -
Cv mist*T(i+1))*dme5 + (Cpa*Tma -
Cv mist*T(i+1))*dma5)/(m(i)*(Cv mist+dCv mist));
dP\overline{5} = P(i+1)*((1/m(i+1))*dm5 + (1/T(i+1))*dT5 - (1/V(i))*dV(i));
T(i+1) = T(i) + (dteta/90)*(7*dT + 32*dT2 + 12*dT3 + 32*dT4 + 7*dT5);
P(i+1) = P(i) + (dteta/90) * (7*dP + 32*dP2 + 12*dP3 + 32*dP4 + 7*dP5);
m(i+1) = m(i) + (dteta/90) * (7*dm + 32*dm2 + 12*dm3 + 32*dm4 + 7*dm5);
응응응응응
fluxo massico(i) = (w/90)*(7*dm + 32*dm2 + 12*dm3 + 32*dm4 + 7*dm5);
fluxo massico esc(i) = (w/90)*(7*dme + 32*dme2 + 12*dme3 + 32*dme4 +
7*dme5);
fluxo_massico_adm(i) = (w/90)*(7*dma + 32*dma2 + 12*dma3 + 32*dma4 +
7*dma5);
inc massa adm = (dteta/90)*(7*dma + 32*dma2 + 12*dma3 + 32*dma4 +
7*dma5);
% Determinação da fração de gás residual
if inc massa adm>0 && (m bf(i)==0 || m bf(i)<0)</pre>
FGR(i+1) = 1 - ((1-FGR(i))*m(i) + inc massa adm)/m(i+1);
else
FGR(i+1) = FGR(i);
end
if m bf(i)>0
m bf(i+1) = m bf(i) - inc massa adm;
else
m bf(i+1) = 0;
end
waitbar(((i+(720-angfeva)*n)/(720*n+1)),Barra);
Fracoes.produtos(1,i) = Composicao.yp Arg;
Fracoes.produtos(2,i) = Composicao.yp CO;
Fracoes.produtos(3,i) = Composicao.yp_CO2;
Fracoes.produtos(4,i) = Composicao.yp_H;
Fracoes.produtos(5,i) = Composicao.yp_H2;
Fracoes.produtos(6,i) = Composicao.yp_H2O;
Fracoes.produtos(7,i) = Composicao.yp_OH;
```

```
Fracoes.produtos(8,i) = Composicao.yp O;
Fracoes.produtos(9,i) = Composicao.yp 02;
Fracoes.produtos(10,i) = Composicao.yp N;
Fracoes.produtos(11,i) = Composicao.yp N2;
Fracoes.produtos(12,i) = Composicao.yp NO;
Fracoes.produtos(13,i) = Composicao.yp_NO2;
Fracoes.residuos(1,i) = Composicao.ygr_Arg;
Fracoes.residuos(2,i) = Composicao.ygr CO;
Fracoes.residuos(3,i) = Composicao.ygr CO2;
Fracoes.residuos(4,i) = Composicao.ygr H;
Fracoes.residuos(5,i) = Composicao.ygr H2;
Fracoes.residuos(6,i) = Composicao.ygr H2O;
Fracoes.residuos(7,i) = Composicao.ygr OH;
Fracoes.residuos(8,i) = Composicao.ygr 0;
Fracoes.residuos(9,i) = Composicao.ygr 02;
Fracoes.residuos(10,i) = Composicao.ygr N;
Fracoes.residuos(11,i) = Composicao.ygr N2;
Fracoes.residuos(12,i) = Composicao.ygr NO;
Fracoes.residuos(13,i) = Composicao.ygr NO2;
```

#### end

```
Saida.P = P;
Saida.T = T;
Saida.composicao = Fracoes;
Saida.dml = fluxo_massico;
Saida.dma = fluxo_massico_adm;
Saida.dme = fluxo_massico_esc;
Saida.FGR = FGR;
```

### end

function Saida = FF2Z(Cinematica, Motor, Calibracao, Entrada, Comb)
global n
global dteta
global Barra
global Composicao
global angic
global A\_t
global B\_t
global n\_t
vp = Cinematica.vp;
V = Cinematica.V;

A = Cinematica.A; w = Cinematica.w; dV = Cinematica.dV; P = Entrada.P;

```
T = Entrada.T;
m = Entrada.m;
FGR = Entrada.FGR;
```

PCI = Comb.PCI; m\_comb = Comb.m\_comb;

```
angfeva = Motor.angfeva;
angieve = Motor.angieve+720;
T_camisa = Calibracao.T_camisa;
[Xb,dXb,ef comb,angfc] = RoHR(Calibracao,Motor);
Tb(1:720*n+1) = 0;
Tu = T;
Tu(angfeva*n+1:720*n+1) = 0;
criterio det = 0;
for i = angfeva*n:angieve*n-1
mb = Xb(i) *m(i);
mu = m(i) - mb;
dmb = dXb(i) *m(i);
dmu = -dXb(i) *m(i);
% Calcula os calores específicos para a mistura:
if i < (angfc*n)</pre>
[Rreag, Cvreag, dCvreag, Cpreag] = Propriedades('r', Tu(i));
[Rprod, Cvprod, dCvprod, Cpprod] = Propriedades('gr', Tu(i));
Cvu = Cvreag*(1 - FGR(angfeva*n)) + Cvprod*FGR(angfeva*n);
Cpu = Cpreag*(1 - FGR(angfeva*n)) + Cpprod*FGR(angfeva*n);
dCvu = dCvreag*(1 - FGR(angfeva*n)) + dCvprod*FGR(angfeva*n);
Ru = Rreag*(1 - FGR(angfeva*n)) + Rprod*FGR(angfeva*n);
else
Ru = 0;
Cvu = Cvb;
Cpu = Cpb;
dCvu = dCvb;
end
% Temperatura de chama adiabática:
if i == angic*n
   Tb(i) = 2000;
   Tb aux = 0;
   while abs(Tb(i) - Tb aux) > 0.1
      Tb aux = Tb(i);
      [\sim, \sim, \sim, Cpb] = Propriedades('p', Tb(i));
      Tb(i) = (Cpu*Tu(i) + m comb*ef comb*PCI/m(i))/Cpb;
   end
end
if i > angic*n-1
[Rb,Cvb,dCvb,Cpb] = Propriedades('p',Tb(i));
else
Rb = 0;
Cvb = Cvu;
dCvb = dCvu;
Cpb = Cpu;
end
Vu(i) = mu*Ru*Tu(i)/P(i);
```

```
Vb(i) = mb*Rb*Tb(i)/P(i);
Au = A(i) * Vu(i) / V(i);
Ab = A(i) * Vb(i) / V(i);
if Vu \sim = 0
hu = 130*(Vu(i)^{(-0.06)})*((P(i)^{1e-5})^{0.8})*(T(i)^{(-0.4)})*(vp+1.4)^{0.8};
else
hu = 0;
end
if Vb \sim = 0
hb = 130*(Vb(i)^{(-0.06)})*((P(i)^{1e-5})^{0.8})*(Tb(i)^{(-1e-5)})
0.4))*(vp+1.4)^0.8;
else
hb = 0;
end
% Solver (RK-5):
<u> ୧</u>୧୧୫
dP1 = (Vb(i) * Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i)) + Vu(i) * Ru/(Cpu + dCvu*Tu(i)) -
V(i))...
    \langle P(i) * dV(i) - Ru * Tu(i) * dmu - Rb * Tb(i) * dmb + \dots
    (Ru/(Cpu + dCvu*Tu(i)))*(hu*Au*(Tu(i) - T camisa)/w) -...
    (Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i)))*(ef comb*m comb*PCI*dXb(i) - hb*Ab*(Tb(i)
- T camisa)/w + ...
    dmb*(Cpu*Tu(i) - Cpb*Tb(i)));
if mb \sim = 0
dTb1 = (mb*(Cpb + dCvb)) \setminus (ef comb*m comb*PCI*dXb(i) - hb*Ab*(Tb(i) - bb*Ab*(Tb(i))))
T camisa)/w + ...
            Vb(i)*dP1 + dmb*(Cpu*Tu(i) - Cpb*Tb(i));
else
dTb1 = 0;
end
if mu ~= 0
dTu1 = (mu*(Cpu + dCvu*Tu(i)))\(-hu*Au*(Tu(i) - T camisa)/w +
Vu(i)*dP1);
else
dTu1 = 0;
end
P(i+1) = P(i) + dP1*dteta/4;
if i<angfc*n</pre>
Tu(i+1) = Tu(i) + dTu1*dteta/4;
end
if i>angic*n-1
Tb(i+1) = Tb(i) + dTb1*dteta/4;
end
Vu(i+1) = mu*Ru*Tu(i+1)/P(i+1);
Vb(i+1) = mb*Rb*Tb(i+1)/P(i+1);
Au = A(i) * Vu(i+1) / V(i);
Ab = A(i) * Vb(i+1) / V(i);
```

```
dP2 = (Vb(i+1)*Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)) + Vu(i+1)*Ru/(Cpu +
dCvu*Tu(i+1)) - V(i))...
    \(P(i+1)*dV(i) - Ru*Tu(i+1)*dmu - Rb*Tb(i+1)*dmb + ...
    (Ru/(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))*(hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w) -...
    (Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)))*(ef_comb*m_comb*PCI*dXb(i) -
hb*Ab*(Tb(i+1) - T camisa)/w + ...
    dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
if mb \sim = 0
dTb2 = (mb*(Cpb + dCvb)) \ (ef comb*m comb*PCI*dXb(i) - hb*Ab*(Tb(i+1) -
T camisa)/w + ...
            Vb(i+1)*dP2 + dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
else
dTb2 = 0;
end
if mu ~= 0
dTu2 = (mu*(Cpu + dCvu*Tu(i+1))) \ (-hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w +
Vu(i+1)*dP2);
else
dTu2 = 0;
end
P(i+1) = P(i) + dP1*dteta/8 + dP2*dteta/8;
if i < angfc*n</pre>
Tu(i+1) = Tu(i) + dTu1*dteta/8 + dTu2*dteta/8;
end
if i > angic*n-1
Tb(i+1) = Tb(i) + dTb1*dteta/8 + dTb2*dteta/8;
end
Vu(i+1) = mu*Ru*Tu(i+1)/P(i+1);
Vb(i+1) = mb*Rb*Tb(i+1)/P(i+1);
Au = A(i) * Vu(i+1) / V(i);
Ab = A(i) * Vb(i+1) / V(i);
dP3 = (Vb(i+1)*Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)) + Vu(i+1)*Ru/(Cpu +
dCvu*Tu(i+1)) - V(i))...
    \(P(i+1)*dV(i) - Ru*Tu(i+1)*dmu - Rb*Tb(i+1)*dmb + ...
    (Ru/(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))*(hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w) -...
    (Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)))*(ef comb*m comb*PCI*dXb(i) -
hb*Ab*(Tb(i+1) - T camisa)/w + ...
    dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
if mb \sim = 0
dTb3 = (mb*(Cpb + dCvb)) \setminus (ef comb*m comb*PCI*dXb(i) - hb*Ab*(Tb(i+1) - bb*Ab*(Tb(i+1))))
T \text{ camisa})/w + \dots
            Vb(i+1)*dP3 + dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
else
dTb3 = 0;
end
if mu \sim = 0
dTu3 = (mu*(Cpu + dCvu*Tu(i+1))) \setminus (-hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w +
Vu(i+1)*dP3);
else
dTu3 = 0;
end
P(i+1) = P(i) + dP3*dteta - dP2*dteta/2;
if i < angfc*n</pre>
Tu(i+1) = Tu(i) + dTu3*dteta - dTu2*dteta/2;
```

```
end
if i > angic*n-1
Tb(i+1) = Tb(i) + dTb3*dteta - dTb2*dteta/2;
end
Vu(i+1) = mu*Ru*Tu(i+1)/P(i+1);
Vb(i+1) = mb*Rb*Tb(i+1)/P(i+1);
Au = A(i) * Vu(i+1) / V(i);
Ab = A(i) * Vb(i+1) / V(i);
dP4 = (Vb(i+1) * Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)) + Vu(i+1) * Ru/(Cpu + 1))
dCvu*Tu(i+1)) - V(i))...
    \(P(i+1)*dV(i) - Ru*Tu(i+1)*dmu - Rb*Tb(i+1)*dmb + ...
    (Ru/(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))*(hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w) -...
    (Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)))*(ef comb*m comb*PCI*dXb(i) -
hb*Ab*(Tb(i+1) - T camisa)/w + ...
    dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
if mb \sim = 0
dTb4 = (mb*(Cpb + dCvb)) \setminus (ef comb*m comb*PCI*dXb(i) - hb*Ab*(Tb(i+1) - bb*Ab*(Tb(i+1))))
T camisa)/w + ...
             Vb(i+1)*dP4 + dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
else
dTb4 = 0;
end
if mu ~= 0
dTu4 = (mu*(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))\(-hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w +
Vu(i+1)*dP4);
else
dTu4 = 0;
end
P(i+1) = P(i) + 3*dP1*dteta/16 + 9*dP4*dteta/16;
if i < angfc*n</pre>
Tu(i+1) = Tu(i) + 3*dTu1*dteta/16 + 9*dTu4*dteta/16;
end
if i > angic*n-1
Tb(i+1) = Tb(i) + 3*dTb1*dteta/16 + 9*dTb4*dteta/16;
end
Vu(i+1) = mu*Ru*Tu(i+1)/P(i+1);
Vb(i+1) = mb*Rb*Tb(i+1)/P(i+1);
Au = A(i) * Vu(i+1) / V(i);
Ab = A(i) * Vb(i+1) / V(i);
dP5 = (Vb(i+1)*Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)) + Vu(i+1)*Ru/(Cpu +
dCvu*Tu(i+1)) - V(i))...
    \(P(i+1)*dV(i) - Ru*Tu(i+1)*dmu - Rb*Tb(i+1)*dmb + ...
    (Ru/(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))*(hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w) -...
    (Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)))*(ef comb*m comb*PCI*dXb(i) -
hb*Ab*(Tb(i+1) - T camisa)/w + ...
    dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
if mb \sim = 0
dTb5 = (mb*(Cpb + dCvb)) \setminus (ef comb*m comb*PCI*dXb(i) - hb*Ab*(Tb(i+1) - bb*Ab*(Tb(i+1))))
T camisa)/w + ...
             Vb(i+1)*dP5 + dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
else
dTb5 = 0;
end
```

```
if mu \sim = 0
dTu5 = (mu*(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))\(-hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w +
Vu(i+1)*dP5);
else
dTu5 = 0;
end
P(i+1) = P(i) - 3*dP1*dteta/7 + 2*dP2*dteta/7 + 12*dP3*dteta/7 -
12*dP4*dteta/7 + 8*dP5*dteta/7;
if i < angfc*n</pre>
Tu(i+1) = Tu(i) - 3*dTu1*dteta/7 + 2*dTu2*dteta/7 + 12*dTu3*dteta/7 -
12*dTu4*dteta/7 + 8*dTu5*dteta/7;
end
if i > angic*n-1
Tb(i+1) = Tb(i) - 3*dTb1*dteta/7 + 2*dTb2*dteta/7 + 12*dTb3*dteta/7 -
12*dTb4*dteta/7 + 8*dTb5*dteta/7;
end
Vu(i+1) = mu*Ru*Tu(i+1)/P(i+1);
Vb(i+1) = mb*Rb*Tb(i+1)/P(i+1);
Au = A(i) * Vu(i+1) / V(i);
Ab = A(i) * Vb(i+1) / V(i);
dP6 = (Vb(i+1)*Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)) + Vu(i+1)*Ru/(Cpu +
dCvu*Tu(i+1)) - V(i))...
    \(P(i+1)*dV(i) - Ru*Tu(i+1)*dmu - Rb*Tb(i+1)*dmb + ...
    (Ru/(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))*(hu*Au*(Tu(i+1) - T camisa)/w) -...
    (Rb/(Cpb + dCvb*Tb(i+1)))*(ef comb*m comb*PCI*dXb(i) -
hb*Ab*(Tb(i+1) - T camisa)/w + ...
    dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
if mb \sim = 0
dTb6 = (mb*(Cpb + dCvb)) \setminus (ef_comb*m_comb*PCI*dXb(i) - hb*Ab*(Tb(i+1) - bb*Ab*(Tb(i+1))))
T camisa)/w + ...
            Vb(i+1)*dP6 + dmb*(Cpu*Tu(i+1) - Cpb*Tb(i+1)));
else
dTb6 = 0;
end
if mu ~= 0
dTu6 = (mu*(Cpu + dCvu*Tu(i+1)))\(-hu*Au*(Tu(i+1)) - T camisa)/w +
Vu(i+1)*dP6);
else
dTu6 = 0;
end
P(i+1) = P(i) + (dteta/90) * (7*dP1 + 32*dP3 + 12*dP4 + 32*dP5 + 7*dP6);
if i < angfc*n</pre>
Tu(i+1) = Tu(i) + (dteta/90)*(7*dTu1 + 32*dTu3 + 12*dTu4 + 32*dTu5 +
7*dTu6);
else
Tu(i+1) = 0;
end
if i > angic*n-1
Tb(i+1) = Tb(i) + (dteta/90)*(7*dTb1 + 32*dTb3 + 12*dTb4 + 32*dTb5 +
7*dTb6);
else
Tb(i+1) = 0;
end
m(i+1) = m(i);
```

```
T(i+1) = (Tb(i+1)*mb + Tu(i+1)*mu)/m(i+1);
88888
FGR(i+1) = FGR(i) + (1 - FGR(i)) * Xb(i);
if i<anqfc*n+1</pre>
   tau = A t*((P(i)*1e-5)^(-n_t))*exp(B_t/Tu(i));
   criterio det = criterio det + 1000*dteta/(w*tau);
end
waitbar(((i-angfeva*n)/(720*n+1)),Barra);
Fracoes.produtos(1,i) = Composicao.yp Arg;
Fracoes.produtos(2,i) = Composicao.yp CO;
Fracoes.produtos(3,i) = Composicao.yp CO2;
Fracoes.produtos(4,i) = Composicao.yp H;
Fracoes.produtos(5,i) = Composicao.yp H2;
Fracoes.produtos(6,i) = Composicao.yp H2O;
Fracoes.produtos(7,i) = Composicao.yp OH;
Fracoes.produtos(8,i) = Composicao.yp O;
Fracoes.produtos(9,i) = Composicao.yp 02;
Fracoes.produtos(10,i) = Composicao.yp_N;
Fracoes.produtos(11,i) = Composicao.yp_N2;
Fracoes.produtos(12,i) = Composicao.yp NO;
Fracoes.produtos(13,i) = Composicao.yp NO2;
Fracoes.residuos(1,i) = Composicao.ygr Arg;
Fracoes.residuos(2,i) = Composicao.ygr CO;
Fracoes.residuos(3,i) = Composicao.ygr CO2;
Fracoes.residuos(4,i) = Composicao.ygr_H;
Fracoes.residuos(5,i) = Composicao.ygr_H2;
Fracoes.residuos(6,i) = Composicao.ygr_H2O;
Fracoes.residuos(7,i) = Composicao.ygr OH;
Fracoes.residuos(8,i) = Composicao.ygr 0;
Fracoes.residuos(9,i) = Composicao.ygr 02;
Fracoes.residuos(10,i) = Composicao.ygr N;
Fracoes.residuos(11,i) = Composicao.ygr N2;
Fracoes.residuos(12,i) = Composicao.ygr NO;
Fracoes.residuos(13,i) = Composicao.ygr NO2;
end
Tb(1:angic*n) = NaN;
Tu(angfc*n:720*n+1) = NaN;
Saida.P = P;
Saida.T = T;
Saida.m = m;
Saida.FGR = FGR;
Saida.Tu = Tu;
Saida.Tb = Tb;
Saida.composicao = Fracoes;
Saida.detonacao = criterio det;
end
function [dm,Cpm,Tm] = Fluxo(Pc,Tc,Gas,CA,w,valvula)
global Padm
```

```
global Pesc
global Tadm
global Tesc
Tbf = 520;
switch valvula
    case 'a'
    Pext = Padm;
    Text = Tadm;
    case 'e'
    Pext = Pesc;
    Text = Tesc;
end
if Pc>Pext;
    Pm = Pc;
    Pj = Pext;
    Tm = Tc;
    Tj = Text;
    Cpm = Gas.Cp;
    Cvm = Gas.Cv;
    Rm = Gas.R;
    sentido = -1;
else
    Pj = Pc;
    Tj = Tc;
    Pm = Pext;
    switch valvula
        case 'e'
        Tm = Text;
        [Rm,Cvm,~,Cpm] = Propriedades('gr',Tm);
        case 'a'
        if Gas.BF>0
        Tm = Tbf;
        [Rm,Cvm,~,Cpm] = Propriedades('gr',Tm);
        else
        Tm = Text;
        [Rm, Cvm, ~, Cpm] = Propriedades('r', Tm);
        end
    end
    sentido = 1;
end
k = Cpm/Cvm;
if (Pj/Pm) < (2/(k+1))^{(k/(k-1))}
    dm = sentido*(CA*Pm/sqrt(Rm*Tm))*sqrt(k*(2/(k+1))^((k+1)/((k-1))))
1))))/w;
else
    dm = sentido*(CA*Pm/sqrt(Rm*Tm))*sqrt((2*k/(k-1))*((Pj/Pm)^(2/k) -
(Pj/Pm)^((k+1)/k)))/w;
end
end
```

%% COEFICIENTES DOS POLINÔMIOS INTERPOLADORES PARA DETERMINAÇÃO DAS %% PROPRIEDADES DAS SUBSTÂNCIAS

```
global R
R = 8.3143;
%% 1) ARGÔNIO
global C_Arg
global M Arg
C \operatorname{Arg}(1,1) = 0.0;
C_Arg(1,2) = 0.0;
C \operatorname{Arg}(1,3) = 0.0;
C \operatorname{Arg}(1, 4) = 0.0;
C \operatorname{Arg}(1,5) = 0.0;
C \operatorname{Arg}(1, 6) = -3.3678e - 15;
C_Arg(1,7) = 20.786;
C \operatorname{Arg}(2, 1) = 0;
C_Arg(2, 2) = 0;
C_Arg(2,3) = 0;
C_Arg(2, 4) = 0;
C_Arg(2, 5) = 0;
C_Arg(2, 6) = -3.3678e - 15;
C_{Arg(2,7)} = 20.786;
M \text{ Arg} = 39.94e-3;
%% 2) MONÓXIDO DE CARBONO
global C CO
global M CO
C CO(1, 1) = 0;
C_{CO}(1,2) = 0;
C_{CO(1,3)} = -4.4540e-4;
C_CO(1,4) = 2.2257e-4;
C_{CO}(1,5) = 0.14397;
C CO(1, 6) = -0.69261;
C_{CO}(1,7) = 29.934;
C CO(2,1) = 4.7523e-8;
C CO(2,2) = -6.6045e-6;
C CO(2,3) = 3.5024e-4;
C CO(2, 4) = -8.4653e-3;
C CO(2,5) = 7.3447e-2;
C CO(2, 6) = 0.52016;
C CO(2,7) = 26.216;
M CO = 28.01e-3;
%% 3) DIÓXIDO DE CARBONO
global C CO2
global M CO2
C CO2(1,1) = 0;
C CO2(1,2) = 0;
C CO2(1,3) = -4.4603e-4;
C CO2(1, 4) = 2.8209e-2;
```

```
C_{CO2}(1,5) = -0.65488;
C CO2(1, 6) = 7.6637;
C CO2(1,7) = 19.418;
C_{CO2}(2, 1) = 0;
C_{CO2}(2,2) = 9.9035e-7;
C_{CO2}(2,3) = -1.4825e-4;
C_{C02}(2, 4) = 8.9390e-3;
C = -0.27556;
C CO2(2, 6) = 4.5286;
C CO2(2,7) = 29.042;
M CO2 = 44.01e-3;
%% 4) HIDROGÊNIO ATÔMICO
global C H
global M H
C H(1,1) = 0;
C_H(1,2) = 0;
C_H(1,3) = 0;
C_H(1, 4) = 0;
C_H(1, 5) = 0;
C_H(1,6) = -3.5683e-15;
C H(1,7) = 20.786;
C H(2,1) = 0;
C H(2,2) = 0;
C H(2,3) = 0;
C H(2, 4) = 0;
C_H(2, 5) = 0;
C_H(2,6) = -3.5683e-15;
C_H(2,7) = 20.786;
M H = 1.008e-3;
%% 5) HIDROGÊNIO
global C_H2
global M_H2
C H2(1,1) = -1.4586e-4;
C H2(1,2) = 6.2203e-3;
C H2(1,3) = -1.0924e-1;
C H2(1,4) = 1.0129;
C H2(1,5) = -5.2082;
C H2(1,6) = 14.077;
CH2(1,7) = 13.576;
C_{H2}(2,1) = 2.889e-8;
C_H2(2,2) = -4.9735e-6;
C_{H2}(2,3) = 3.4892e-4;
C_H2(2, 4) = -1.2592e-2;
C_{H2}(2,5) = 2.375e-1;
C_{H2}(2, 6) = -1.7771;
C_{H2}(2,7) = 33.793;
```

M H2=2.016e-3;

```
%% 6) ÁGUA
global C H2O
global M H2O
C H2O(1,1) = -5.9005e-5;
C_{H2O}(1,2) = 2.0144e-3;
C_{H2O(1,3)} = -2.5728e-2;
C_H2O(1,4) = 1.3914e-1;
C_{H20}(1,5) = -1.2026e-1;
C H2O(1,6) = -5.0867e-1;
C_{H20}(1,7) = 34.086;
C H2O(2,1) = 4.4391e-8;
C H2O(2,2) = -7.1527e-6;
C H2O(2,3) = 4.5866e-4;
CH2O(2,4) = -1.4392e-2;
CH20(2,5) = 1.9997e-1;
CH20(2,6) = 0.12508;
C_H2O(2,7) = 30.484;
M H20 = 18e-3;
%% 7) HIDROXILA
global C OH
global M OH
C OH(1, 1) = 0;
C OH(1,2) = -1.4917e-3;
C OH(1,3) = 4.3664e-2;
C OH(1, 4) = -4.8947e-1;
C OH(1,5) = 2.6974;
C OH(1, 6) = -7.5392;
C OH(1,7) = 38.345;
C OH(2,1) = 9.3676e-9;
C_OH(2,2) = -2.9604e-6;
C_OH(2,3) = 2.7778e-4;
C_OH(2, 4) = -1.1572e-2;
C_OH(2,5) = 2.2762e-1;
C_OH(2, 6) = -1.6355;
COH(2,7) = 33.367;
M OH = 17.0074e-3;
%% 8) OXIGÊNIO ATÔMICO
global C O
global M O
C O(1,1) = 2.7779e-5;
C O(1,2) = -1.2238e-3;
C_0(1,3) = 2.2539e-2;
C_0(1, 4) = -2.2446e-1;
C_0(1,5) = 1.2988;
C_0(1, 6) = -4.2879;
C O(1,7) = 27.587;
```

```
C O(2,1) = 2.9471e-9;
C_0(2,2) = -5.0607e-7;
C_0(2,3) = 3.442e-5;
C_0(2, 4) = -1.1749e-3;
C_0(2,5) = 2.2111e-2;
C_0(2, 6) = -2.2773e-1;
C_{0}(2,7) = 21.859;
M = 16e-3;
%% 9) OXIGÊNIO
global C O2
global M_02
C \ O2(1,1) = -1.0460e-4;
C_{02}(1,2) = 3.7162e-3;
C_{02}(1,3) = -4.9720e-2;
C O2(1,4) = 2.9268e-1;
C_{02}(1,5) = -5.8615e-1;
C_02(1,6) = 1.4506e-1;
C_{02}(1,7) = 29.525;
C \ O2(2,1) = -2.9433e-8;
C \ 02(2,2) = 5.0826e-6;
C \ O2(2,3) = -3.5703e-4;
C O2(2,4) = 1.2996e-2;
C \ O2(2,5) = -2.5971e-1;
C O2(2,6) = 2.9462;
C \ O2(2,7) = 21.478;
M \ O2 = 32e-3;
%% 10) NITROGÊNIO ATÔMICO
global C N
global M N
C N(1, 1) = 0;
C N(1,2) = 0;
C N(1,3) = 0;
C N(1, 4) = 0;
C N(1, 5) = 0;
C N(1, 6) = 3.44e - 15;
C N(1,7) = 20.786;
C N(2,1) = -9.3952e-10;
C_N(2,2) = 4.7529e-8;
C_N(2,3) = 3.5127e-6;
C_N(2, 4) = -2.4785e-4;
C_N(2,5) = 5.4922e-3;
C_N(2, 6) = -5.2460e-2;
C N(2,7) = 20.971;
M_N = 14.0067e-3;
%% 11) NITROGÊNIO
```

```
global C N2
global M N2
C_N2(1,1) = -1.6935e-5;
C_N2(1,2) = 9.4082e-4;
C_N2(1,3) = -1.9484e-2;
C_N2(1, 4) = 1.8732e-1;
C_N2(1,5) = -8.0587e-1;
C N2(1, 6) = 1.5673;
C N2(1,7) = 27.979;
C N2(2,1) = 0;
C N2(2,2) = 2.9116e-7;
C N2(2,3) = -4.6826e-5;
C N2(2,4) = 3.0703e-3;
C N2(2,5) = -1.0444e-1;
C N2(2,6) = 1.9239;
C_N2(2,7) = 21.270;
M N2 = 28.01e-3;
%% 12) ÓXIDO DE NITROGÊNIO
global C NO
global M_NO
C NO(1,1) = -3.3074e-5;
C NO(1,2) = 1.2032e-3;
C NO(1,3) = -1.5033e-2;
C NO(1,4) = 4.8652e-2;
C NO(1,5) = 4.332e-1;
C_{NO}(1, 6) = -2.9246;
C_{NO}(1,7) = 34.35;
C NO(2,1) = 7.8467e-9;
C_{NO}(2,2) = -5.8357e-7;
C_NO(2,3) = -1.2445e-5;
C NO(2, 4) = 2.5417e-3;
C_NO(2,5) = -1.0164e-1;
C_NO(2, 6) = 1.8535;
C NO(2,7) = 23.254;
M NO = 30.0067e-3;
%% 13) DIÓXIDO DE NITROGÊNIO
global C NO2
global M_NO2
C NO2(1, 1) = 0;
C_NO2(1,2) = -7.2251e-4;
C_NO2(1,3) = 2.7095e-2;
C_NO2(1, 4) = -3.8911e-1;
C_NO2(1,5) = 2.4652;
C_NO2(1, 6) = -3.8962;
C_NO2(1,7) = 35.019;
C NO2(2,1) = -4.3664e-8;
C NO2(2,2) = 7.5743e-6;
```

```
C NO2(2,3) = -5.4585e-4;
C NO2(2,4) = 2.1082e-2;
C \text{ NO2}(2,5) = -4.6711e-1;
C NO2(2, 6) = 5.7971;
C_{NO2}(2,7) = 24.576;
M_NO2 = 46.0067e-3;
%% ETANOL
global C_etanol
C \text{ etanol}(1) = 0.0014;
C = -8.1208e - 1;
C \text{ etanol}(3) = 21.237;
C_{etanol(4)} = 9.2838;
%% GASOLINA-FERGUNSON
global C gasolina
C_gasolina(1) = 4.06;
C_{gasolina(2)} = 0.0601;
C_gasolina(3) = -1.88e-6;
C_gasolina(4) = 0.0;
C_gasolina(5) = 0.0;
C_{gasolina(6)} = -40530;
C gasolina(7) = -2.83250;
%% ENTALPIA DE FORMACAO
global hf
hf.Ar = 0;
hf.CO = -110530;
hf.CO2 = -393522;
hf.H = 217990;
hf.H2 = 0;
hf.H20 = -241826;
hf.OH = 38987;
hf.0 = 249170;
hf.02 = 0;
hf.N = 472680;
hf.N2 = 0;
hf.NO = 90291;
hf.NO2 = 33100;
%% ENTROPIAS ABSOLUTAS
global so
so.Ar = 154.845;
so.CO = 197.650;
so.CO2 = 213.795;
so.H = 114.718;
so.H2 = 130.680;
so.H2O = 188.834;
so.OH = 183.708;
so.0 = 161.058;
```

```
so.02 = 205.147;
so.N = 153.300;
so.N2 = 191.609;
so.NO = 210.758;
so.NO2 = 240.034;
%% GIBBS DE FORMAÇÃO
global Gf
Gf.Ar = 0;
Gf.CO = -137163;
Gf.CO2 = -394389;
Gf.H = 203278;
Gf.H2 = 0;
Gf.H2O = -228582;
Gf.OH = 34277;
Gf.0 = 231736;
Gf.02 = 0;
Gf.N = 455540;
Gf.N2 = 0;
Gf.NO = 86600;
Gf.NO2 = 51258;
%% EXERGIA QUÍMICA
global Ech
Ech.Ar = 11690;
Ech.CO = 277053;
Ech.CO2 = 19825.3;
Ech.H = 321326;
Ech.H2 = 236090;
Ech.H2O = 9477.97;
Ech.OH = 154782;
Ech.O = 233758;
Ech.02 = 3970.03;
Ech.N = 455880;
Ech.N2 = 719.983;
Ech.NO = 88941.3;
Ech.NO2 = 55588.0216;
Ech.Etanol = 1361884;
Ech.Gaoslina = 0;
%% CONSTANTES DE INTEGRAÇÃO
global C_h
C h.Ar = 0;
C_h.CO = 41.33015;
C_h.CO2 = -612.2085;
C_h.H = 0.345;
Ch.H2 = -143.1906;
C h.H2O = 313.1932;
Ch.OH = -55.44111;
C h.O = 68.92685;
C h.O2 = 43.31801;
Ch.N = -10.92771;
Ch.N2 = 486.398843;
C h.NO = 165.7319;
```

```
C h.NO2 = -415.519;
global C s
C s.Ar = 0;
C s.CO = 0.16800055;
C = -1.4249366;
C = -0.0013559;
C = -0.3905966;
C_{s.H2O} = 0.69387465;
C = -0.1182619;
Cs.0 = 0.17568343;
Cs.02 = 0.164309;
Cs.N = -0.0353209;
Cs.N2 = 1.189856;
C s.NO = 0.47485171;
C = -0.9245526;
function [Rm,Cv,dCv,Cp] = Propriedades(h,T)
global Programa
t = T/100;
global R
global C Arg
global C<sup>CO</sup>
global C CO2
global C H
global C H2
global C_H2O
global COH
global C_O
global C_02
global C N
global C N2
global C NO
global C NO2
global C etanol
global C_gasolina
global M Arg
global M_CO
global M_CO2
global M H
global M H2
global M H2O
global M OH
global M O
global M O2
global M N
global M N2
global M NO
global M NO2
global Composicao
    y N2 = Composicao.y N2;
    y O2 = Composicao.y O2;
    y CO2 = Composicao.y CO2;
```
```
y Arg = Composicao.y Arg;
    y H2Oar = Composicao.y H2Oar;
    y comb = Composicao.y comb;
    n etanol = Composicao.n etanol;
    ygr_Arg = Composicao.ygr Arg;
    ygr_CO = Composicao.ygr_CO;
    ygr_CO2 = Composicao.ygr_CO2;
    ygr H = Composicao.ygr H;
    ygr H2 = Composicao.ygr H2;
    ygr H2O = Composicao.ygr H2O;
    ygr OH = Composicao.ygr OH;
    ygr O = Composicao.ygr O;
    ygr O2 = Composicao.ygr O2;
    yqr N = Composicao.yqr N;
    ygr N2 = Composicao.ygr N2;
    ygr NO = Composicao.ygr NO;
    ygr NO2 = Composicao.ygr NO2;
    yp Arg = Composicao.yp Arg;
    yp CO = Composicao.yp CO;
    yp CO2 = Composicao.yp CO2;
    yp H = Composicao.yp H;
    yp H2 = Composicao.yp H2;
    yp H2O = Composicao.yp H2O;
    yp OH = Composicao.yp OH;
    yp O = Composicao.yp O;
    yp O2 = Composicao.yp O2;
    yp N = Composicao.yp N;
    yp_N2 = Composicao.yp N2;
    yp_NO = Composicao.yp NO;
    yp NO2 = Composicao.yp NO2;
    M comb = Composicao.M comb;
%% Propriedades de cada espécie:
if t<10
   range = 1;
else
    range = 2;
end
Cp Arg =
C Arg(range,1)*(t^6)+C Arg(range,2)*(t^5)+C Arg(range,3)*(t^4)+C Arg(r
ange, 4) * (t^3) + C Arg (range, 5) * (t^2) + C Arg (range, 6) * (t) + C Arg (range, 7);
Cv Arg = Cp Arg-R;
dCv Arg =
(6*C Arg(range,1)*(t^5)+5*C Arg(range,2)*(t^4)+4*C Arg(range,3)*(t^3)+
3*C Arg(range,4)*(t^2)+2*C Arg(range,5)*(t)+C Arg(range,6))/100;
Cp CO =
C CO(range,1)*(t^6)+C CO(range,2)*(t^5)+C CO(range,3)*(t^4)+C CO(range
,4)*(t^3)+C CO(range,5)*(t^2)+C CO(range,6)*(t)+C CO(range,7);
Cv CO = Cp CO-R;
dCv CO =
(6*C CO(range,1)*(t^5)+5*C CO(range,2)*(t^4)+4*C CO(range,3)*(t^3)+3*C
CO(range, 4) * (t^2) + 2 * C CO(range, 5) * (t) + C CO(range, 6)) / 100;
```

Cp CO2 =C CO2(range,1)\*(t^6)+C CO2(range,2)\*(t^5)+C CO2(range,3)\*(t^4)+C CO2(r ange,4)\*(t^3)+C CO2(range,5)\*(t^2)+C CO2(range,6)\*(t)+C CO2(range,7);  $Cv CO2 = Cp_CO2-R;$ dCv CO2 = (6\*C CO2(range,1)\*(t^5)+5\*C CO2(range,2)\*(t^4)+4\*C CO2(range,3)\*(t^3)+ 3\*C CO2(range,4)\*(t^2)+2\*C CO2(range,5)\*(t)+C CO2(range,6))/100; Ср Н = C H(range,1)\*(t^6)+C H(range,2)\*(t^5)+C H(range,3)\*(t^4)+C H(range,4)\*  $(t^{3})+C$  H(range, 5)\* $(t^{2})+C$  H(range, 6)\*(t)+C H(range, 7); Cv H = Cp H - R;dCv H =(6\*C H(range,1)\*(t^5)+5\*C H(range,2)\*(t^4)+4\*C H(range,3)\*(t^3)+3\*C H( range, 4) \*  $(t^2) + 2 C H(range, 5) * (t) + C H(range, 6)) / 100;$ Ср Н2 = C H2(range,1)\*(t^6)+C H2(range,2)\*(t^5)+C H2(range,3)\*(t^4)+C H2(range  $(\overline{4}) * (t^3) + C H2 (range, \overline{5}) * (t^2) + C H2 (range, \overline{6}) * (t) + C H2 (range, 7);$ Cv H2 = Cp H2-R;dCv H2 =(6\*C H2(range,1)\*(t^5)+5\*C H2(range,2)\*(t^4)+4\*C H2(range,3)\*(t^3)+3\*C \_H2(range,4)\*(t^2)+2\*C\_H2(range,5)\*(t)+C\_H2(range,6))/100; Cp H2O = C H2O(range,1)\*(t^6)+C H2O(range,2)\*(t^5)+C H2O(range,3)\*(t^4)+C H2O(r ange,4)\*(t^3)+C H2O(range,5)\*(t^2)+C H2O(range,6)\*(t)+C H2O(range,7); Cv H2O = Cp H2O-R;dCv H2O =(6\*C H2O(range,1)\*(t^5)+5\*C H2O(range,2)\*(t^4)+4\*C H2O(range,3)\*(t^3)+ 3\*C H2O(range,4)\*(t^2)+2\*C H2O(range,5)\*(t)+C H2O(range,6))/100; Ср ОН = C OH(range,1)\*(t^6)+C OH(range,2)\*(t^5)+C OH(range,3)\*(t^4)+C OH(range , 4) \* (t^3) + C OH (range, 5) \* (t^2) + C OH (range, 6) \* (t) + C OH (range, 7); Cv OH = Cp OH-R;dCv OH = (6\*C OH(range,1)\*(t^5)+5\*C OH(range,2)\*(t^4)+4\*C OH(range,3)\*(t^3)+3\*C \_OH(range,4)\*(t^2)+2\*C\_OH(range,5)\*(t)+C OH(range,6))/100; Cp 0 = C O(range,1)\*(t^6)+C O(range,2)\*(t^5)+C O(range,3)\*(t^4)+C O(range,4)\* (t^3)+C O(range, 5) \* (t^2)+C O(range, 6) \* (t)+C O(range, 7); Cv O = Cp O - R;dCv O =(6\*C O(range,1)\*(t^5)+5\*C O(range,2)\*(t^4)+4\*C O(range,3)\*(t^3)+3\*C O( range, 4) \* (t^2) + 2 \* C O(range, 5) \* (t) + C O(range, 6)) / 100; Cp 02 = C O2(range,1)\*(t^6)+C O2(range,2)\*(t^5)+C O2(range,3)\*(t^4)+C O2(range , 4) \*  $(t^3) + C_{02} (range, 5) * (t^2) + C_{02} (range, 6) * (t) + C_{02} (range, 7);$  $Cv_{02} = Cp_{02}-R;$ dCv O2 = (6\*C 02(range,1)\*(t^5)+5\*C 02(range,2)\*(t^4)+4\*C 02(range,3)\*(t^3)+3\*C \_O2(range,4)\*(t^2)+2\*C\_O2(range,5)\*(t)+C O2(range,6))/100; Cp N =C N(range,1)\*(t^6)+C N(range,2)\*(t^5)+C N(range,3)\*(t^4)+C N(range,4)\* (t^3)+C N(range, 5) \* (t^2)+C N(range, 6) \* (t)+C\_N(range, 7); Cv N = Cp N-R;

```
dCv N =
(6*C N(range,1)*(t^5)+5*C N(range,2)*(t^4)+4*C N(range,3)*(t^3)+3*C N(
range, 4) * (t^2) + 2 * C N(range, 5) * (t) + C N(range, 6)) / 100;
Cp_N2 =
C_N2(range,1)*(t^6)+C_N2(range,2)*(t^5)+C_N2(range,3)*(t^4)+C_N2(range
, 4) * (t^3) + C N2 (range, 5) * (t^2) + C N2 (range, 6) * (t) + C N2 (range, 7);
Cv_N2 = Cp N2-R;
dCv N2 =
(6*C N2(range,1)*(t^5)+5*C N2(range,2)*(t^4)+4*C N2(range,3)*(t^3)+3*C
N2(range, 4)*(t^2)+2*C N2(range, 5)*(t)+C N2(range, 6))/100;
Cp NO =
C NO(range,1)*(t^6)+C NO(range,2)*(t^5)+C NO(range,3)*(t^4)+C NO(range
, 4) * (t^3) + C NO (range, 5) * (t^2) + C NO (range, 6) * (t) + C NO (range, 7);
Cv NO = Cp NO-R;
dCv NO =
(6*C NO(range,1)*(t^5)+5*C NO(range,2)*(t^4)+4*C NO(range,3)*(t^3)+3*C
NO(range,4)*(t^2)+2*C NO(range,5)*(t)+C NO(range,6))/100;
Cp NO2 =
C NO2(range,1)*(t^6)+C NO2(range,2)*(t^5)+C NO2(range,3)*(t^4)+C NO2(r
ange,4)*(t^3)+C NO2(range,5)*(t^2)+C NO2(range,6)*(t)+C NO2(range,7);
Cv_NO2 = Cp_NO2-R;
dCv NO2 =
(6*C NO2(range,1)*(t^5)+5*C NO2(range,2)*(t^4)+4*C NO2(range,3)*(t^3)+
3*C NO2(range,4)*(t<sup>2</sup>)+2*C NO2(range,5)*(t)+C NO2(range,6))/100;
Cp etanol =
C etanol(1)*(t^3)+C etanol(2)*(t^2)+C etanol(3)*t+C etanol(4);
Cv etanol = Cp etanol-R;
dCv etanol = (3*C \text{ etanol}(1)*(t^2)+2*C \text{ etanol}(2)*t+C \text{ etanol}(3))/100;
Cp gasolina =
(C gasolina(1)+C gasolina(2)*(100*t)+C gasolina(3)*((100*t)^2)+C gasol
ina(4)*((100*t)^3)+C gasolina(5)*(100*t)^4)*R;
Cv gasolina = Cp gasolina-R;
dCv gasolina =
(C gasolina(2)+2*C gasolina(3)*((100*t))+3*C gasolina(4)*((100*t)^2)+4
*C gasolina(5)*(100*t)^3)*R;
%% Propriedades da mistura
switch h
    case 'r'
    switch Programa.combustivel
    case 'EOH'
        Cp_comb=n_etanol*Cp_etanol+Cp_H2O*(1-n_etanol);
        Cv comb=Cp comb-R;
        dCv comb=dCv etanol*n etanol+dCv H2O*(1-n etanol);
    case 'G'
        Cp comb = Cp gasolina*(1-n etanol) + Cp etanol*n etanol;
        Cv comb = Cv gasolina*(1-n etanol) + Cv etanol*n etanol;
        dCv comb = dCv gasolina*(1-n etanol) + dCv etanol*n etanol;
```

M reag = y\_N2\*M\_N2+y\_O2\*M\_O2+y\_CO2\*M\_CO2+y\_Arg\*M\_Arg+y H2Oar\*M H2O+y comb\*M com b; Cp=(y\_N2\*Cp\_N2+y\_02\*Cp\_02+y\_C02\*Cp\_C02+y\_Arg\*Cp\_Arg+y\_H2Oar\*Cp\_H2O+y\_c omb\*Cp\_comb)/M\_reag; Cv=(y N2\*Cv N2+y O2\*Cv O2+y CO2\*Cv CO2+y Arg\*Cv Arg+y H2Oar\*Cv H2O+y c omb\*Cv comb)/M reag; dCv=(y N2\*dCv N2+y O2\*dCv O2+y CO2\*dCv CO2+y Arg\*dCv Arg+y H2Oar\*dCv H 20+y comb\*dCv comb)/M reag; Rm = R/M\_reag; case 'gr' M gr = M Arg\*ygr Arg + M CO\*ygr CO + M CO2\*ygr CO2 + M H\*ygr H + M H2\*ygr H2 ... + M H2O\*ygr H2O + M OH\*ygr OH + M O\*ygr O + M O2\*ygr O2 + M N\*ygr N + M N2\*ygr N2 ... + M NO\*ygr NO + M NO2\*ygr NO2; Cv = (Cv\_Arg\*ygr\_Arg + Cv\_CO\*ygr\_CO + Cv\_CO2\*ygr\_CO2 + Cv\_H\*ygr\_H + Cv\_H2\*ygr\_H2 ... + Cv\_H2O\*ygr\_H2O + Cv\_OH\*ygr\_OH + Cv\_O\*ygr\_O + Cv\_O2\*ygr\_O2 + Cv N\*ygr N + Cv N2\*ygr N2 ... + Cv NO\*ygr NO + Cv NO2\*ygr NO2)/M gr; Cp = (Cp Arg\*ygr Arg + Cp CO\*ygr CO + Cp CO2\*ygr CO2 + Cp H\*ygr H + Cp H2\*ygr H2 ... + Cp H2O\*yqr H2O + Cp OH\*yqr OH + Cp O\*yqr O + Cp O2\*yqr O2 + Cp N\*ygr N + Cp N2\*ygr N2 ... + Cp\_NO\*ygr\_NO<sup>+</sup> Cp NO2\*ygr NO2)/M gr; dCv = (dCv Arg\*ygr Arg + dCv CO\*ygr CO + dCv CO2\*ygr CO2 + dCv\_H\*ygr\_H + dCv H2\*ygr H2 ... + dCv H20\*ygr H20 + dCv OH\*ygr OH + dCv O\*ygr O + dCv O2\*ygr O2 + dCv N\*ygr N + dCv N2\*ygr N2 ... + dCv NO\*ygr NO + dCv NO2\*ygr NO2)/M gr; Rm = R/M gr; case 'p' M prod = M Arg\*yp Arg + M CO\*yp CO + M CO2\*yp CO2 + M H\*yp H + М Н2\*ур Н2 ... + M H2O\*yp H2O + M OH\*yp OH + M O\*yp O + M O2\*yp O2 + M N\*yp N + M N2\*yp N2 ... + M NO\*yp NO + M NO2\*yp NO2; Cv = (Cv Arg\*yp Arg + Cv CO\*yp CO + Cv CO2\*yp CO2 + Cv H\*yp H + Cv\_H2\*yp\_H2 ... + Cv\_H2O\*yp\_H2O + Cv\_OH\*yp\_OH + Cv\_O\*yp\_O + Cv\_O2\*yp\_O2 +  $Cv_N*yp_N + Cv_N2*yp_N2 \dots$ + Cv\_NO\*yp\_NO + Cv\_NO2\*yp\_NO2)/M\_prod;  $Cp = (Cp_Arg^*yp_Arg + Cp_CO^*yp_CO + Cp_CO^*yp_CO^2 + Cp_H^*yp_H + Cp_CO^*yp_CO^*yp_CO^2 + Cp_H^*yp_H + Cp_CO^*yp_CO^*$ Ср\_Н2\*ур\_Н2 ... + Cp H2O\*yp H2O + Cp OH\*yp OH + Cp O\*yp O + Cp O2\*yp O2 + Cp N\*yp N + Cp N2\*yp N2 ... + Cp NO\*yp NO + Cp NO2\*yp NO2)/M prod;  $dCv = (dCv_Arg^*yp_Arg + dCv_C0^*yp_C0 + dCv_C0^*yp_C0^2 + dCv_H^*yp_H$ + dCv\_H2\*yp\_H2<sup>-</sup>... + dCv\_H2O\*yp\_H2O + dCv\_OH\*yp\_OH + dCv\_O\*yp\_O + dCv\_O2\*yp\_O2 + dCv\_N\*yp\_N + dCv\_N2\*yp\_N2 ...

```
+ dCv NO*yp NO + dCv NO2*yp NO2)/M prod;
    Rm = R/M prod;
end
end
function [Xb,dXb,ef comb,angfc] = RoHR(Calibracao,Motor)
global n
global teta
global angic
global tetacomb
lambda = Calibracao.lambda;
N = Calibracao.N;
angieve = Motor.angieve+720;
angfc = angic+tetacomb;
ef comb = 0.99*(-1.602+4.6509*lambda-2.0746*(lambda^2));
ef queima = 0.999;
a = log(1-ef queima);
m = 2;
Xb(1:angic*n+1)=0;
dXb(1:angic*n+1)=0;
Xb(angic*n+1:angieve*n+1) = (1-exp(a*((teta(angic*n+1:angieve*n+1) - 
(angic*pi/180))/(tetacomb*pi/180)).^(m+1)));
dXb(angic*n+1:angieve*n+1) =- (a*exp(a*(-(angic*pi/180 -
teta(angic*n+1:angieve*n+1))/(tetacomb*pi/180)).^(m + 1)).*(-
(angic*pi/180 - teta(angic*n+1:angieve*n+1))/(tetacomb*pi/180)).^m*(m
+ 1))/(tetacomb*pi/180);
Xb(angieve*n+1:720*n+1) = Xb(angieve*n+1);
dXb(angieve*n+1:720*n+1)=0;
end
%% Solver do ciclo termodinâmico
function Resultados = Solver(Motor, Calibracao)
global n
global teta
global dteta
global Ambiente
global R
global Padm
global Barra
global flag eq
global Composicao
P0 = Ambiente.P0;
TO = Ambiente.TO;
angfeva = Motor.angfeva;
angieve = Motor.angieve+720;
d = Motor.d;
flag1 = 1;
flag2 = 1;
n = 20;
```

```
global Programa
erro convergencia = 0;
while flag1 == 1;
flag1 = 0;
%% Definição dos eventos e valores iniciais:
dteta = pi/(180*n);
teta = 0:dteta:4*pi;
Dados cinematica = Cinematica(Motor, Calibracao);
[CAve, CAva] = Comando de valvulas(Motor);
iteracao = 1;
%% Cálculo do ciclo:
% Condições iniciais
V = Dados cinematica.V;
[y comb, M comb, PCI] = Combustivel(Calibracao);
Comb.y comb = y_comb;
Comb.PCI = PCI;
P(angfeva*n) = Padm;
T(angfeva*n) = T0;
FGR(angfeva*n) = 0.033;
flag eq = 0;
[Rreag,~,~,~] = Propriedades('r',T0);
[Rprod,~,~,~] = Propriedades('gr',T0);
Rmist = Rreag*(1-FGR(angfeva*n)) + Rprod*FGR(angfeva*n);
m(angfeva*n) = P(angfeva*n)*V(angfeva*n)/(Rmist*T(angfeva*n));
while flag2 == 1
flag2 = 0;
mensagem = sprintf('Iteração #%i (n = %i)',iteracao,n);
Barra = waitbar(0,mensagem);
Iteracao anterior = [P(angfeva*n) T(angfeva*n) m(angfeva*n)];
Inicial.P = P;
Inicial.T = T;
Inicial.m = m;
Inicial.FGR = FGR;
[Rreag,~,~,~] = Propriedades('r',T0);
[Rprod, ~, ~, ~] = Propriedades('gr', T0);
Rmist = Rreag*(1-FGR(angfeva*n)) + Rprod*FGR(angfeva*n);
m(angfeva*n) = P(angfeva*n)*V(angfeva*n)/(Rmist*T(angfeva*n));
m reag = m(angfeva*n)*(1-FGR(angfeva*n));
M reag = R/Rreag;
n reag = m reag/M reag;
m comb = n reag*y comb*M comb;
Comb.m comb = m comb;
Ciclo fechado = FF2Z(Dados cinematica, Motor, Calibracao, Inicial, Comb);
Ciclo aberto =
FA(Dados_cinematica,Calibracao,Motor,CAve,CAva,Ciclo_fechado,d);
close(Barra);
```

```
P = Ciclo aberto.P;
T = Ciclo aberto.T;
m = Ciclo_aberto.m;
FGR = Ciclo_aberto.FGR;
Composicao.ygr_Arg = Composicao.yp_Arg;
Composicao.ygr_CO = Composicao.yp_CO;
Composicao.ygr_CO2 = Composicao.yp_CO2;
Composicao.ygr H = Composicao.yp H;
Composicao.ygr_H2 = Composicao.yp H2;
Composicao.ygr H2O = Composicao.yp H2O;
Composicao.ygr OH = Composicao.yp OH;
Composicao.ygr O = Composicao.yp O;
Composicao.ygr O2 = Composicao.yp O2;
Composicao.ygr N = Composicao.yp N;
Composicao.ygr N2 = Composicao.yp N2;
Composicao.ygr NO = Composicao.yp NO;
Composicao.ygr NO2 = Composicao.yp NO2;
Tu = Ciclo fechado.Tu;
Tb = Ciclo fechado.Tb;
Tb(angieve*n:720*n+1) = T(angieve*n:720*n+1);
Tu(1:angfeva*n+1) = T(1:angfeva*n+1);
criterio convergencia = [P(angfeva*n) T(angfeva*n) m(angfeva*n)]/1e3;
if abs(P(angfeva*n)-Iteracao anterior(1))>criterio convergencia(1)
    flag2 = 1;
end
if abs(T(angfeva*n)-Iteracao_anterior(2))>criterio_convergencia(2)
    flag2 = 1;
end
if abs(m(angfeva*n)-Iteracao anterior(3))>criterio convergencia(3)
    flag2 = 1;
end
iteracao = iteracao+1;
if iteracao>8
   flag1 = 1;
   break
end
end
n = n + 10;
if n>50
    erro convergencia = 1;
    return
end
end
%% Determinação dos resultados:
Resultados.erro = erro_convergencia;
Resultados.P = P;
Resultados.T = T;
Resultados.m = m;
```

```
Resultados.composicao = Ciclo_aberto.composicao;
    Resultados.Tu = Tu;
    Resultados.Tb = Tb;
Resultados.dml = Ciclo aberto.dml;
Resultados.dma = Ciclo aberto.dma;
Resultados.dme = Ciclo_aberto.dme;
Resultados.detonacao = Ciclo fechado.detonacao;
Resultados.CAC = 3*30*m_comb*Calibracao.N;
Resultados.Wi = (P-P0).*Dados_cinematica.dV;
Resultados.Wa = dteta*(P-P0)*Dados_cinematica.dV';
Resultados.dW = 3*Resultados.Wa*Calibracao.N/120e3;
Resultados.FGR = FGR;
Resultados.V = Dados_cinematica.V;
Vd = max(Dados_cinematica.V) -min(Dados_cinematica.V);
Resultados.IMEP = Resultados.Wa*1e-5/Vd;
Resultados.efV = m(angfeva*n+1)/(P0*Vd/(Rmist*T0));
```

end