



UNIVERSIDADE DO VALE DO PARAÍBA FACULDADE DE ENGENHARIAS, ARQUITETURAS E URBANISMO ENGENHARIA EM QUÍMICA

Estudo Comparativo da Queima de Gasolina e Etanol em Motores de Combustão Interna

FÁBIO VIEIRA DA SILVA

UNIVERSIDADE DO VALE DO PARAÍBA FACULDADE DE ENGENHARIAS, ARQUITETURAS E URBANISMO ENGENHARIA EM QUÍMICA

Estudo Comparativo da Queima de Gasolina e Etanol em Motores de Combustão Interna

Relatório apresentado como Trabalho de Conclusão de Curso para fins de obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Química da Faculdade de Engenharias, Arquitetura e Urbanismo da Universidade do Vale do Paraíba.

Orientadora: Profa. Ma. Ana Maria Barbosa

RESUMO

O mundo atual vem se preocupando cada vez mais com o meio ambiente e os efeitos que os combustíveis fósseis causam no planeta, com relação a sua queima e liberação dos gases de efeito estufa. Vários acordos internacionais divergem para que a comunidade internacional busque novos combustíveis menos poluentes, mais eficientes e renováveis. Por este motivo, foi feito um estudo comparativo da queima da gasolina, etanol e suas frações em motores de combustão interna, por meio de um modelo computacional criado pelos cientistas Sanford Gordon e Bonnie J. McBride. Neste programa, chamado de CEARUN – NASA, foi possível simular a combustão da gasolina e do etanol em várias condições de temperatura, pressão e frações. Verificando a mistura que libera mais energia, mais eficiente energeticamente e a mistura menos poluente para o meio ambiente em relação a liberação de gases de efeito estufa como o monóxido e dióxido de carbono, Verificou-se ainda a eficiência energética e os gases liberados da combustão da mistura que hoje é a utilizada nos postos de combustíveis. Por fim, foi mostrado um estudo de viabilidade econômica, no qual possibilitou a obtenção do percentual máximo de preço entre a gasolina e o etanol, percentual este possível de ganho econômico inicial no que tange a utilização do etanol no lugar da gasolina.

PALAVRAS-CHAVE: Energia. Poluentes. Viabilidade Econômica.

ABSTRACT

Society has increasingly become concerned with the envirolnment and the impact that fossil fuels cause on the planet, related to its burning and greenhouse effect gas. Several international deals differ so the international community aim new fuel that is also less polluting, more efficient and renewable. Therefore, a comparative study was done about gasoline and ethanol combustion, besides their fractions in intern combustion engines by a computational model created by scientists Sanford Gordon and Bonnie J. McBride. In this program called CEARUN – NASA, it was possible to simulate the gasoline and ethanol combustion in several temperature, pressure and fraction conditions by verifying the mixture that liberates more energy, more efficient energetically and less of a polluting mixture for the envirolnmet in terms of greenhouse effect gas liberation, such as monoxide and carbon dioxide. It was verifyed the energetic efficiency and the liberated gases from the mixture burning which is currently used at gas stations. At last, a study was presented concerning economic viability in which it was possible to obtain a maximum price percentage between gasoline and ethanol; such percentage allows economic gain concerning the usage of ethanol instead of gasoline.

KEYWORDS: Energy. Polluting. Economic Viability.

SUMÁRIO

1 Iı	ntrodução	07
	1.1 Normas Ambientais	07
	1.2 Acordos Internacionais	08
	1.3 Etanol	10
	1.3.1 Processo de Produção do Etanol	10
	1.3.2 Fermentação	10
	1.3.3 Destilação	11
	1.4 Gasolina	12
	1.4.1 Dessalgação	12
	1.4.2 Destilação	12
	1.4.3 Processo Downstream	13
	1.4.3.1 Craqueamento Térmico	13
	1.4.3.2 Craqueamento Catalítico	14
	1.4.3.3 Hidrocraqueamento	14
	1.4.3.4 Alquilação	16
	1.5 Principais Poluentes Liberados no Refino do Petróleo	16
	1.5.1 Contaminações Atmosféricas	16
	1.5.2 Contaminações Hídricas	17
	1.5.3 Contaminantes Sólidos	17
	1.6 Motores de Combustão Interna	17
	1.6.1 Admissão	18
	1.6.2 Compressão	18
	1.6.3 Potência	18
	1.6.4 Descarga	18
	1.7 CEARUN	19
	1.8 Objetivo	19
2 N	lateriais e Métodos	20
	2.1 Simulação	20
	2.2 Compilação dos Dados	25
	2.3 Viabilidade Econômica	26
3 P	esultados e Discussões	27

3.1 Resultados das Simulações	27
3.2 Estudos dos Dados das Simulações	27
3.3 Emissões de Gases nas Simulações	29
3.4 Comparativo entre as Emissões Reais e Simulações	33
3.4.1 Cálculo das Massas	34
3.5 Viabilidade Econômica	37
4 Conclusão	38
Referências	39
Anexos	41

1 INTRODUÇÃO

Com o passar dos anos, o ser humano buscou o desenvolvimento tecnológico para melhorar sua vida, conforto e segurança. Porém, na busca destas tecnologias avançadas e do crescente aumento no consumo de energia, acabou-se gerando um efeito colateral: a destruição da camada de ozônio, o efeito estufa e a poluição do meio ambiente. Tal desequilíbrio fez surgir preocupações pelo mundo todo. [1]

Para suprir a demanda de energia consumida pelo mundo, começou-se a utilização -em larga escala- de combustíveis fósseis como carvão, gás natural e derivados de petróleo. Entretanto, este consumo de energia vem crescendo a cada ano e com isso, as emissões de gases de efeito estufa para a atmosfera também cresce na mesma proporção; em média, calcula-se um crescimento anual de 2% no consumo de energia no mundo. Além do consumo de energia, a utilização de combustíveis fósseis para meios de transporte também vem aumentando, emitindo mais gases de efeito estufa para a atmosfera. No Brasil, cerca de 80% da energia utilizada é gerada dentro do país, os outros 21,5% restante é importada, sendo a maior parte petróleo e gás natural. Do total de consumo de energia, 22% são para o setor de transporte. [2]

Com a queima de combustíveis fósseis, houve um aumento na geração de gases de efeito estufa: dióxido de carbono, monóxido de carbono, metano e óxido de nitrogênio. Uma vez que os mesmos são de difícil dispersão, acabam retendo parte da energia irradiada pelo sol, que deveria retornar para o espaço. Normalmente, 65% desta energia é absorvida pela terra para mantê-la aquecida e 35% é refletida de volta para o espaço na forma de radiação infravermelha. Os gases de efeito estufa formam uma camada isolante, que retém parte desta radiação, supostamente a retornar para o espaço, aumentando assim a temperatura da atmosfera terrestre. Tem-se como consequências a elevação dos níveis dos mares devido ao derretimento das calotas polares, o surgimento de desertos causados pelo desequilíbrio de vários ecossistemas e ondas de calor. Com as mudanças climáticas, muitas espécies estão sendo extintas. [3]

1.1 Normas Ambientais.

Na década de 1980, o Brasil entra no rol dos países que passaram a se preocupar com a situação do aquecimento global, passando a monitorar a emissão dos gases de efeito estufa. Em maio de 1986, a Resolução 18/86 CONAMA criou o Programa de Controle de Poluição do Ar por Veículos Automotores, o PROCONVE, controlado pelo IBAMA. Em 1993, a lei 8.723 tornou obrigatória a redução das emissões de gases poluentes de origem veicular. Desde a sua criação, em 1986, houveram seis fases, sendo a última em 2014, que estabeleceram os seguintes

valores de emissões: Monóxido de Carbono (CO) em 1,3g/Km, Hidrocarbonetos não Metanos (NMHC) em 0,05g/Km, Oxido de Nitrogênio (NOx) em 0,08g/Km e Aldeídos (CHO) em 0,02g/Km. [4]

Em comparação, nos Estados Unidos, a Environmental Protection Agency, EPA, é o órgão que cuida das normas de emissões de gases, sendo os valores máximos de emissões: Monóxido de Carbono (CO) em 2,1g/Km, Hidrocarbonetos não Metanos (NMHC) em 0,05g/Km e Oxido de Nitrogênio (NOx) em 0,12g/Km. [5]

1.2 Acordos Internacionais.

Na década de 70, as ONGs já não se restringiam apenas às questões ambientais, mas também sociais e econômicas, por meio de veículos de comunicação em massa e contando com a ajuda da opinião pública, estas ONGs começaram a pressionar os governos mundiais para a implantação de leis e acordos internacionais. Por meio destas pressões, a Organização das Nações Unidas - ONU, realizou em 1972 a primeira Conferência das Nações Unidas sobre o Meio Ambiente Humano, em Estocolmo, Suécia, representada por 113 países e 250 organizações não governamentais, finalizada com a Declaração sobre o Meio Ambiente Humano, que tinha como objetivo orientar o comportamento e a responsabilidade com a política do Meio Ambiente. Em 1983, a ONU criou a Conferência Mundial sobre o Meio Ambiente e desenvolvimento, para avaliar os resultados dos 10 anos desde a conferência de 1972. No ano de 1992, houve uma nova conferência sediada no Brasil, a Rio-92, representada por 172 países e 1.400 organizações não governamentais, com o propósito de avaliar e sugerir novas tecnologias não poluidoras de energia, criando a famosa "Agenda 21". Em 1997, foi realizada a terceira conferência em Kioto, Japão. Nela, foi estabelecido o Protocolo de Kioto, com o objetivo de estabelecer metas para a redução das emissões de gases efeito estufa. A quarta conferência foi realizada em 2002 na cidade de Johanesburgo, África do Sul, chamada de Conferência Mundial sobre o Desenvolvimento Sustentável, ou Rio+10, com o objetivo de avaliar e solucionar obstáculos encontrados desde a Rio-92. Em 2007, houve a conferência de Bali na Indonésia, em 2009 a conferência de Copenhague na Dinamarca, e em 2011 a conferência de Durban na África do Sul, todas as três conferências tentaram alinhar um tratado de contenção dos gases de efeito estufa, ficando um acordo do qual era esperada aprovação em 2015. [6]

Em dezembro de 2015, foi realizada em Paris, França, a 21º Conferência das Partes – COP-21, na qual foi aprovada por 195 países a redução da emissão dos gases de efeito estufa,

visando manter o aumento de temperatura média global em 2°C. Para isso, os 195 países criaram seu próprio *Intended Nationally Determined Contribution*. A iNDC do Brasil foi o compromisso para a redução das emissões de gases de efeito estufa até 2025 em 37%, comparado a 2005; em 2030, esta redução deverá chegar a 43%, o que deve ocorrer através do aumento no consumo de bioenergia sustentável em 18%, além de reflorestamento de 12 milhões de hectares e atingimento de 45% de energia renovável na matriz energética. Este iNDC corresponde a redução de 75% dos gases de efeito estufa por unidade do PIB até 2030. [7]

Em dezembro de 2015, foi lançado o site *Plume Labs*, que tem por objetivo monitorar o grau de poluição do ar em mais de 200 áreas metropolitanas em todo o mundo, monitoramento este atualizado a cada hora: credibilidade e precisão em tempo real. O *World Air Map*, como mostra a Figura 1, foi apresentado no COP21 na França, e conta com o monitoramento de material particulado, dióxido de nitrogênio e ozônio. O Brasil é representado por um ponto de monitoramento na cidade de São Paulo, indicado na Figura 2. [8]

Figura 1

Fonte: Plume Labs [8]

SAO PAULO AIR REPORT

LIVE WEEK MONTH YEAR

MODERATE pollution

Mon, April 18, 2016

Oct 19 Nov 12 Dec 8 Dec 30 Jan 23 Feb 16 Mar 11 Apr 4

Fonte: Plume Labs [8]

1.3 Etanol.

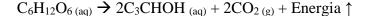
O programa do Pro-Álcool –Programa Nacional do Álcool- surgiu em 1975, financiado pelo governo Brasileiro para substituir a gasolina, derivado do petróleo, devido à crise mundial do petróleo em 1973. O combustível, processado através da fermentação da cana-de-açúcar, era mais barato e menos poluente. Com base na inexistência de carro movido a álcool, o cidadão interessado em utilizar o novo combustível tinha que fazer modificações nos motores, devido à diferença no poder calorífico e corrosão. [9]

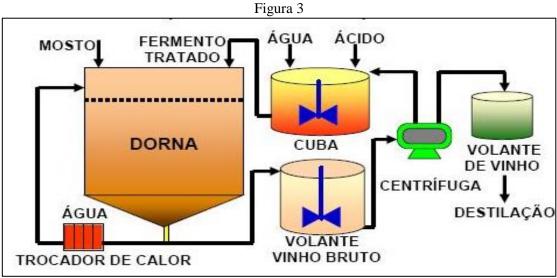
1.3.1 Processo de Produção do Etanol.

No Brasil, é utilizada como matéria prima a cana-de-açúcar para o processo de transformação do açúcar para o etanol, que passa por vários processos de operações unitárias, sendo duas delas extremante importantes: fermentação e destilação.

1.3.2 Fermentação.

Após o processo de preparação da cana-de-açúcar até o mosto, é feita a transferência do mesmo para as dornas de fermentação, onde é adicionado o levedo: é iniciada uma série de reações catalisadas por enzimas especificas. Os monossacarídeos contidos no mosto são metabolizados em piruvato, posteriormente é transformado em acetaldeído através da descarboxilação, com finalização em etanol e gás carbônico.

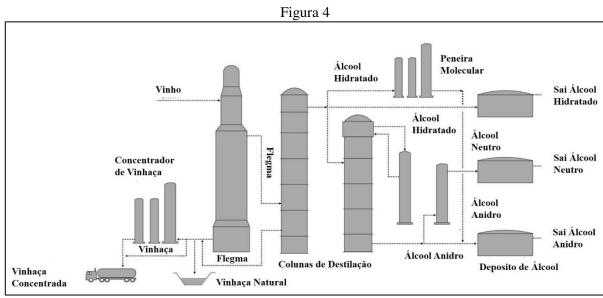




Fonte: ABIMAQ [10]

1.3.3 Destilação.

O produto final é chamado de vinho, ainda a ser decantado e centrifugado para a remoção da levedura. Este vinho é processado em uma primeira coluna de destilação para a retirada de impurezas, como resíduos de células, açúcares não fermentados e sais minerais.



Fonte: SERQUIMICA [11]

Seguindo o esquema acima, o vinho entra em uma coluna de destilação (A), onde é obtido o flegma com produto de topo e a vinhaça como produto de fundo. Na coluna de purificação (B), é obtido o álcool hidratado —de saída lateral-, entre 55% a 65%, e no topo são eliminados vários aldeídos, ésteres, bases voláteis e ácidos. Já na coluna de retificação, é retirado o álcool anidro com o máximo de concentração obtida por destilação, em torno de 96°GL. Esta concentração não pode ser mais elevada por destilação devido a formação de uma mistura azeotrópica. Entre a coluna de purificação e coluna de retificação, é retirado o óleo fúsel.

Para a obtenção do álcool absoluto, o mesmo deve passar por um processo de desidratação, de comum utilização de arrastadores, dentre outros o benzol. O benzol forma uma mistura azeotrópica ternaria, com o ponto de ebulição abaixo do álcool anidro, sendo possível obter concentração em torno de 99,7°GL. Também são utilizadas peneiras moleculares, para a obtenção do álcool absoluto, sendo utilizado, por exemplo, a zeólito, processo este de maior custo. [12]

1.4 Gasolina.

A gasolina é obtida através do refino do petróleo, que utiliza processos como a destilação, craqueamento catalítico, reforma catalítica, craqueamento retardado, hidrocraqueamento catalítico, alquilação e isomerização. O *pool* da gasolina é a mistura de vários hidrocarbonetos entre 5 a 10 átomos de carbono, sendo eles os parafínicos, olefinas, aromáticos e naftênicos, com faixa de ebulição entre 30°C a 220°C, esta gasolina é considerada a tipo A, a gasolina comum que utilizamos é a do tipo C, sendo a mistura da gasolina tipo A em adição ao etanol anidro na porcentagem expressa pela lei federal de 27%, que entrou em vigor em março de 2015. As principais etapas de refino do petróleo até a obtenção da gasolina são: dessalgação, destilação, craqueamento, hidrocraqueamento, alquilação e isomeria. [13]

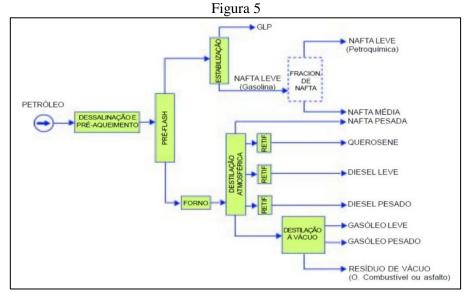
1.4.1 Dessalgação.

O petróleo primeiramente deve passar por um processo de dessalgação, para a retirada de sal que se encontram no petróleo na forma de cristais ou dissolvido, que podem causar vários problemas para o processamento do petróleo, tais como incrustações, corrosão nas torres de destilação e nos trocadores de calor. O processo consiste na aplicação de um campo elétrico com alta intensidade, em torno de 2kV/cm, resultando na desestabilização da emulsão, petróleo e água que foi misturada antes da dessalgação, e separando a mesma em duas fases: petróleo dessalgado e salmoura.

1.4.2 Destilação.

O petróleo dessalgado é pré-aquecido em torno de 300°C a 400°C e segue para uma coluna de destilação atmosférica, onde a maior parte da carga se vaporiza e se fraciona em diversos estágios, entre 30 a 50, cada qual com uma temperatura de condensação. Os produtos de saída são constituídos por:

- Nafta, gasolina e componentes leves, com faixa de temperatura de ebulição menor que 180°C;
 - Querosene, com faixa de temperatura de ebulição entre 180 a 240°C;
 - Gasóleo leve, com faixa de temperatura de ebulição entre 240 a 300°C;
 - Gasóleo pesado, com faixa de temperatura de ebulição entre 300 a 360°C;
 - Resíduo de fundo, com faixa de temperatura de ebulição maior que 360°C;
 - Gás de refino, sendo metano e etano. [14]



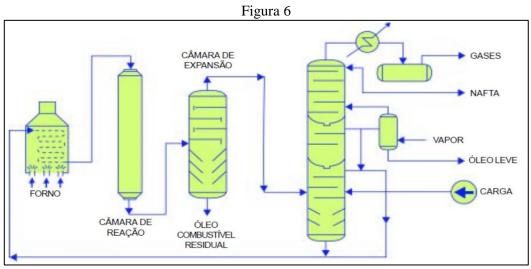
Fonte: Petrobras [15]

1.4.3 Processo Downstream.

Consiste na quebra ou rearranjo das moléculas de hidrocarbonetos para se obter moléculas de melhor qualidade, com maior índice de octanagem. Há também a aplicação de dois tipos de processos, o craqueamento térmico e o craqueamento catalítico, sendo este último mais seletivo e com produto final de melhor qualidade.

1.4.3.1 Craqueamento Térmico.

No Craqueamento térmico, é utilizado alta temperatura e alta pressão: o gasóleo é aquecido a 540°C e mantido a uma pressão de 140psi. Após atingir 500°C, o mesmo é despressurizado e o produto *flash* é ainda fracionado, com rendimento de aproximadamente 10-15%.



Fonte: Petrobras [15]

1.4.3.2 Craqueamento Catalítico.

Conhecido com FCC -Fluid Catalytic Cracking-, o gasóleo em alta temperatura entra em contato com um catalisador, zeólita, ocorrendo a ruptura ou cracking dos hidrocarbonetos, dando origem a uma mistura que posteriormente será fracionados. Como produto, são obtidos o GLP e a nafta, que é utilizada no pool da gasolina. Também são formados produtos mais pesados que a nafta, são chamados de coque, depositados na superfície do catalisador. Sua retirada do catalizador é através de combustão, onde o catalizador é removido e enviando a outro vaso (regenerador), local de processamento da queima.

Uma unidade de FCC é composta pelas seguintes seções:

- Reação ou conversão: local das reações do processo;
- Reação e regeneração do catalisador;
- Fracionamento: receptor do efluente do reator, com fracionamento em vários produtos;
- Recuperação de gases: recebe as frações leves convertidas, fracionando-as em nafta de craqueamento (gasolina), GLP e gás combustível;
- Tratamento: tratamento da nafta, GLP e gás combustível, de modo a torna-los comercializáveis.

1.4.3.3 Hidrocraqueamento.

O hidrocraqueamento é realizado sob pressões parciais elevadas de hidrogênio. Neste processo, a presença de hidrogênio tem como finalidade: reduzir a deposição de coque sobre o catalisador, hidrogenar os compostos aromáticos, hidrogenar olefinas e diolefinas formadas no processo de craqueamento e aumentar a estabilidade química dos produtos finais. Tal série de ações também proporciona a hidrogenação e eliminação de compostos de enxofre e nitrogênio, tornando os produtos finais menos poluentes.

Os catalizadores utilizados normalmente são de óxidos de Níquel-Molibdênio (NiO-MoO) ou óxidos de Níguel-Tungstênio (NiO-WoO₃), com suporte de sílica-alumina (SiO₂-Al₂O₃).

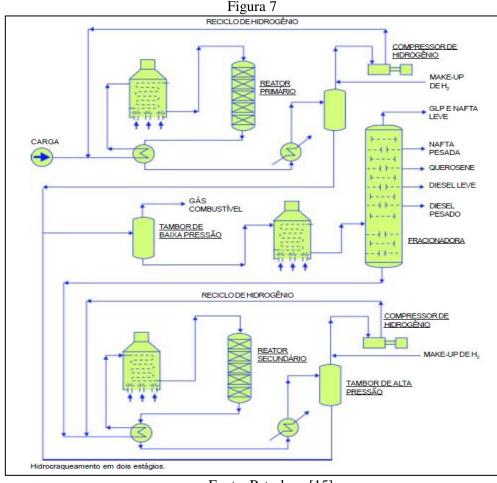
Reação de Hidrogenação simples:

$$R - CH_2 - CH_2 - R' + H_2 \rightarrow R - CH_3 + R' - CH_3$$

Reação de Hidrodesalquilação:

Reação de abertura de anéis naftênicos:

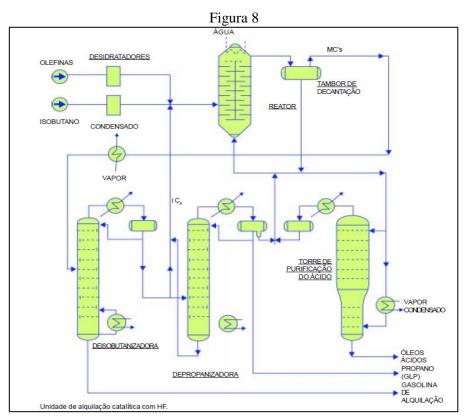
O processo tem início com a adição de hidrogênio ao gasóleo, depois é aquecido e entra em um reator de leito fixo. As reações de hidrogenação são exotérmicas, podendo causar sérios danos ao controle das reações e ao catalisador. Para controlar a temperatura, o mesmo recebe uma corrente de hidrogênio frio. No primeiro estágio de reação, a temperatura é mantida a um nível que permita converter entre 40% e 50% de carga, além de provocar sua dessulfurização e denitrificação. Conforme a carga, a temperatura pode variar de 250 a 450°C, e a pressão oscilar entre 85 e 140 kg/cm². No segundo estágio, trabalham-se as pressões e temperaturas superiores ao do primeiro, entre 450°C e 550°C e pressões entre 180 e 250 kg/cm². O efluente do reator, depois de resfriado, é submetido a dois "flashes", de modo a eliminar o hidrogênio, que é recirculado.



Fonte: Petrobras [15]

1.4.3.4 Alquilação.

É um processo caracterizado pela reunião de duas moléculas, originando uma terceira, de massa molar mais elevada. Esta síntese pode ser feita por energia térmica ou por intermédio de catalisadores. Por energia térmica, são necessárias pressões da ordem de 200 a 500 kg/cm2 e temperaturas em torno de 500°C. Com a utilização de catalisadores, as condições de reação podem ser reduzidas a pressões de 1 a 14 kg/cm2 e temperaturas de 0° a 50°C. Os catalisadores empregados na alquilação são o H₂SO₄ (Kellogg, Stratford) e o HF (UOP, Phillips Petroleum). [16]



Fonte: Petrobras [15]

1.5 Principais Poluentes Liberados no Refino do Petróleo.

O processo de refino do petróleo até a obtenção dos produtos finais, incluindo a gasolina, é um processo altamente agressivo para o meio ambiente, com emissões atmosferas, hídricas e de sólidos dispostos em aterros.

1.5.1 Contaminações Atmosféricas.

Podem ser resumidas na liberação de óxidos de enxofre e nitrogênio, monóxido de carbono, material particulado e hidrocarbonetos, que constituem as emissões fugitivas de

compostos orgânicos voláteis. São liberados nas etapas do processo, eventuais vazamentos, áreas de armazenagem como tancagens e nas queimas de combustíveis em fornos e caldeiras.

1.5.2 Contaminações Hídricas.

Unidades de refino de petróleo consomem muita água e a maior parte deste consumo é utilizado nos sistemas de resfriamentos do processo, o que resulta na contaminação da água por resíduos do processo; os condensados (*stripping*), gerados pelo contato direto do vapor com as frações do petróleo, também carregam contaminantes para o efluente, que carrega para o tratamento frações de óleo, soluções acidas e causticas, alto DBO, fenóis, amônia, sulfetos, glicóis, aminas, sulfonados, compostos de enxofre e sólidos em suspenção.

1.5.3 Contaminantes Sólidos.

Ocorre uma geração considerável de resíduos sólidos no processo, tanto nas armazenagens de produtos quanto descartes de insumos e filtros. Dentre os contaminantes que compõe os resíduos sólidos estão os arsênio, cádmio, cromo, chumbo, bário, mercúrio, selênio e prata, compostos orgânicos como as bifenilas policloradas (BPC's), hidrocarbonetos halogenados, hidrocarbonetos poliaromáticos (HPA's) e compostos inorgânicos como amônia, ácido sulfídrico, benzeno, tolueno, etil-benzeno e xilenos, enxofre (inclusive sob a forma de H2S), hidrocarbonetos aromáticos polinucleados, metais, lamas geradas nos tratamentos de efluente, nos processos de catalise e os próprios catalizadores utilizados.

Especificamente nos tanques de armazenamento de gasolina, há sedimentos que são normalmente compostos por ferrugem e crostas oriundas de dutos e reatores, sendo os constituintes perigosos destes sedimentos os mesmos encontrados na gasolina, incluindo os hidrocarbonetos aromáticos como benzeno, tolueno e xilenos. [17]

1.6 Motores de combustão interna.

Basicamente um motor de combustão interna, gera energia mecânica através da energia térmica liberada pela combustão de um determinado combustível, ao comprimir o combustível e o comburente em uma câmera de combustão. Somados a uma centelha, ocorre a explosão, resultando em gases que, por sua vez, se expandem e impulsionam o pistão de forma a transmitir movimento a um conjunto de eixos e engrenagens acoplados às rodas do veículo, viabilizando movimento ao mesmo. Normalmente, os motores automotivos contêm quatro fases de operação, chamados de Otto ou "Ciclo Otto", criado por Nikolaus August Otto em 1876. As

quatro fases do ciclo operacional são correspondentes à Admissão, Compressão, Potência e Descarga.

1.6.1 Admissão.

Nesta fase é admitida a mistura Ar/Combustível, na câmara do pistão, sendo que o pistão faz um movimento descendente com a válvula de admissão aberta, e a válvula de escape, fechada. Quando o pistão chega ao ponto morto inferior do motor (PMI), a válvula de admissão se fecha, dando início a fase seguinte.

1.6.2 Compressão.

O pistão efetua o movimento ascendente até o ponto morto superior do motor (PMS), pressurizando a mistura Ar/Combustível e aumentando a temperatura no interior da câmara, sem que se inicie uma combustão espontânea.

1.6.3 Potência.

Quando o pistão atinge o ponto PMS na fase de compressão, uma centelha é gerada pela vela, iniciando a combustão da mistura. A explosão libera energia, gerando a expansão dos gases gerados na combustão e consequentemente empurra o pistão para o ponto PMI.

1.6.4 Descarga.

Quando o pistão atinge o ponto PMI, a válvula de escape abre: o pistão novamente efetua o movimento ascendente, descarregando os gases gerados na combustão da mistura. Quando o pistão atinge o ponto PMS, a válvula de escape se fecha e o ciclo recomeça. [18]

Figura 9

Válvula de admisión abierta

Mezcla de gasolina y aire

Sujeción al émbolo

Émbolo

Cigüeñal

Sujeción a la biela

Fonte: Site Termodinâmica ECCI [19]

1.7 CEARUN.

O CEARUN é um programa on-line que foi criado para facilitar o uso do CEA (Chemical Equilibrium with Applications), publicado em 1994 pelos cientistas Sanford Gordon e Bonnie J. McBride. CEA faz parte de uma longa evolução em códigos de equilíbrio químico escritos pelo Lewis Research Center e usados em todo o mundo. Seus antecessores, CEC e CET89, foram os primeiros programas práticos de computador que utiliza a termodinâmica do equilíbrio químico para analisar problemas de combustão e foguetes. Desenvolvimentos subsequentes alargaram estas capacidades para a análise de ondas de choque, detonações Chapman-Jouget (ondas de detonação em altos explosivos, se propaga a uma velocidade tal que os gases reagentes atingem a velocidade do som) e outras aplicações importantes como desempenho teórico de foguetes e parâmetros do tubo de choque para choques incidentes e refletidos. Com uma base de dados termodinâmica contendo mais de 1900 espécies, sendo gasosos e condensados, ele continua sendo o programa padrão para análise detalhada dos problemas que envolvem a combustão, foguetes, choque e detonação. Ele calcula as concentrações de equilíbrio químico dos produtos a partir de qualquer conjunto de reagentes e determina as propriedades termodinâmicas e de transporte para a mistura dos produtos. Este programa pode ser encontrado no site da NASA, por meio do seguinte caminho https://cearun.grc.nasa.gov/>. [20]

1.8 Objetivos.

O objetivo deste trabalho é efetuar um estudo comparativo da queima da gasolina e do álcool em motores de combustão interna, através de simulação computacional que faz uso do programa CEARUN – NASA. Além do estudo do processo de combustão para análise de energia e gases, será realizado também um estudo de viabilidade econômica, a fim de se evidenciar para o consumidor, qual combustível proverá maior benefício de uso.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Para a simulação das condições e rendimentos da combustão do etanol, gasolina e sua mistura, foi utilizado o CEARUN - programa criado pela NASA, com ele seremos capazes de traçar vários perfis de combustão, com variação de temperatura, pressão e proporção da mistura.

2.1 Simulação.

Através do caminho já citado acima, será acessada a primeira página, como mostra a Figura 10. Nesta página, é introduzido o código do processo que será executado: "PROB", "REAC", "ONLY", "OMIT", "INSE", "OUTP", "END", "THER" E "TRAN". Na simulação executada, utilizar-se-á o código "REAC", abreviatura de *reactant* (reagente).

Em seguida, marcar a opção "TP" (temperatura e pressão) em *problem type*; as demais opções seguintes a este último podem permanecer sem alteração. Ao terminar o preenchimento, clicar em "SUBMIT" para o direcionamento à página seguinte.

Enter a 4-character alphanumeric code of your own choosing:

Getting started with CEARUN Click here for CEA Website Important note for users

Problem type:

hp rocket tip det sp tv uw sv shock

Output:

long debug ahort

Output:

keal mole a kl/mole

Output species:

note fraction o mass fraction

Ions:

o no jones ions

Transport properties:

Y = N

Submit Reset

With Applications

Web Privacy Policy and Important Notices

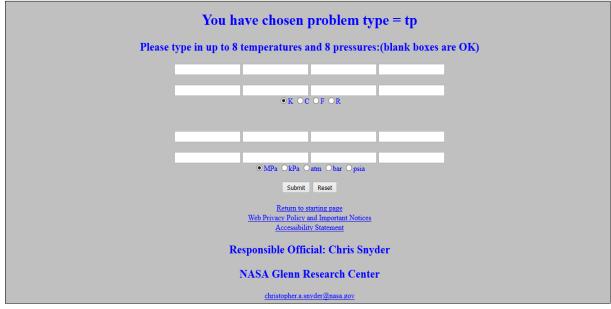
Figura 10 – Tela de inserção de códigos.

Fonte: NASA [21]

Na segunda página, serão informadas as temperaturas e as pressões de trabalho (até 8 variações para temperatura e até 8 para pressão), conforme mostra a Figura 11. Após o término do preenchimento, clicar em "SUBMIT" para a página seguinte.

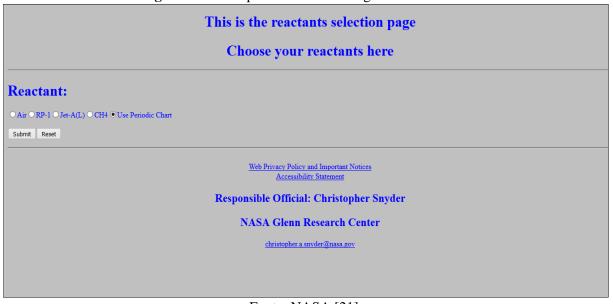
As temperaturas que iremos trabalhar variarão entre 298,15K a 648,15K, pressão de 241 psia. Esta pressão e temperatura são utilizadas por montadoras de veículos (vide Anexo 1).

Figura 11 – Tela de inserção de temperatura e pressão.



Na terceira página, Figura 12, flegar a opção "Use Periodic Chart" e depois clicamos em "SUBMIT" para dar continuidade à simulação.

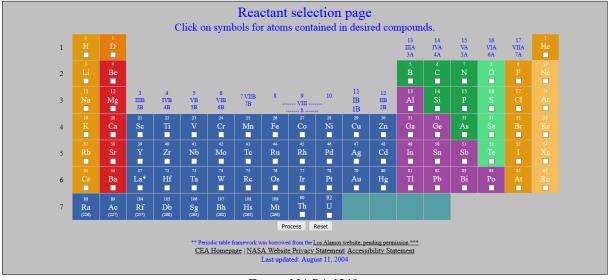
Figura 12 – Tela para escolha de Reagente e Oxidante.



Fonte: NASA [21]

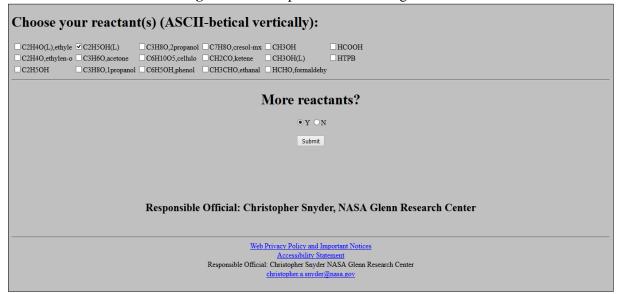
Eis que ocorre o direcionamento para uma página que contém a tabela periódica (Figura 13), na qual marcar-se-ão os elementos que compõem a substância combustível: "C", "H" e "O" para o etanol e "C" e "H" para a gasolina. Em seguida clicamos em "SUBMIT".

Figura 13 – Tabela Periódica.



Em seguida, haverá uma página com opções de fórmulas moleculares, sendo para o Etanol o "C2H5OH (L)" e para a Gasolina o "C8H18 (L) isooct", esta opção é a mais próxima do uso da gasolina, já que a mesma é pool de hidrocarbonetos de 6 a 10 carbonos. Então, clica-se em "SUBMIT", conforme Figura 14.

Figura 14 – Tela para escolha de reagente.



Fonte: NASA [21]

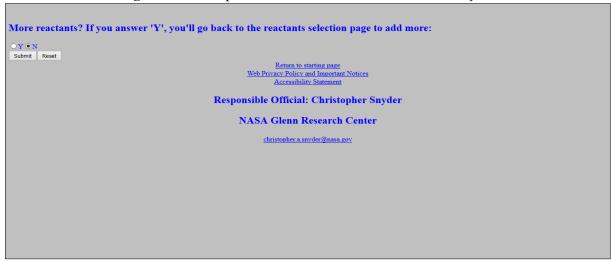
Uma vez escolhidos os combustíveis, será o momento de optar "Air" como comburente e, em seguida, clicar em "SUBMIT" (Figura 15).

Figura 15 – Tela para escolha de Reagente e Oxidante.



A página seguinte contém uma pergunta à respeito de outro possível elemento para a reação. Opta-se por "N" (1ª letra de Não em Inglês) e novamente em "SUBMIT", conforme mostra a Figura 16.

Figura 16 – Tela para se adicionar outros elementos na reação.



Fonte: NASA [21]

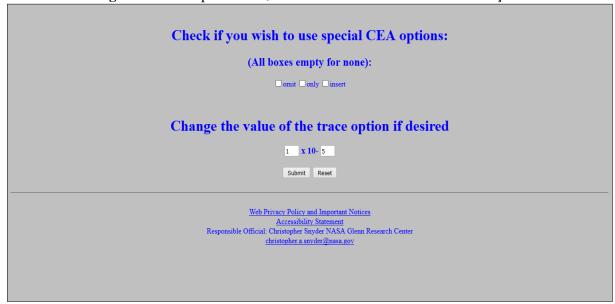
Em seguida, na próxima página, é inserida a relação de porcentagem em massa dos componentes envolvidos na reação, sendo 13,89 para o oxidante e a variação de 1,0 a 0,5 para o etanol e a gasolina (a soma da porcentagem do etanol e da gasolina deve resultar em 1,0). Após acertar a relação de cada um, clica-se em "Enviar dados", conforme Figura 17.

Figura 17 – Tela de inserção das porcentagens.



Nesta página, há opções para: omitir algum elemento do produto da reação *(omit)*, considerar apenas tais elementos *(only)* ou inserir algum elemento *(insert)*. Não marcando nenhuma, o programa supõe que nenhuma escolha foi feita. Em seguida, clica-se em "SUBMIT", como mostra a Figura 18.

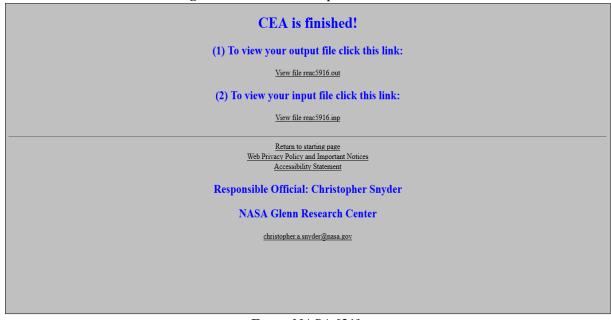
Figura 18 – Tela para omitir, considerar ou inserir elementos na reação.



Fonte: NASA [21]

Após todo o procedimento, é gerado um link para o relatório (Figura 19).

Figura 19 – Tela do link para os resultados.



Fonte: NASA [21]

Neste relatório, estão contidos todos os dados de pressão, temperatura, energia, produtos e reagentes da reação.

Figura 20 – Plotagem da Simulação

Fonte: NASA [21]

2.2 Compilação dos Dados.

Com os dados de várias simulações, será formada uma base de dados no EXCEL para que seja possível, de forma detalhada, o estudo e comparação dos dados das energias envolvidas nas reações, identificando assim qual será a melhor proporção de mistura entre a gasolina e o etanol, qual proporcionará maior rendimento energético para um motor de combustão interna. Verificar-se-á ainda qual mistura é menos agressiva ao meio ambiente, comparando-a com a legislação brasileira.

2.3 Viabilidade econômica.

Será feito um estudo de viabilidade econômica por meio dos dados de rendimento energético, para identificar qual mistura é a mais viável economicamente e fornecer, assim, o valor de mistura mais econômica, dentro de uma faixa de proporção de preço de mercado da gasolina e do etanol.

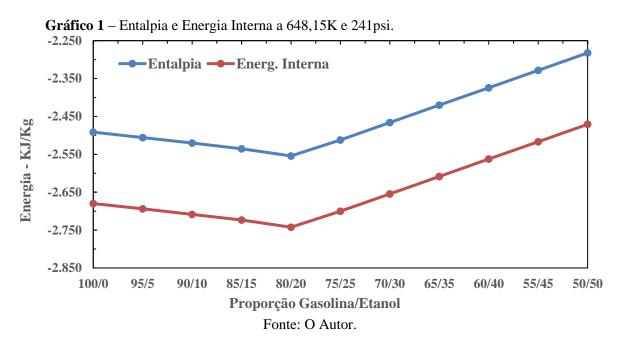
3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

3.1 Resultados das Simulações.

Para as simulações, foram utilizadas frações de misturas entre a gasolina e o etanol, entre 100 a 50%, com intervalo de 5% (Tabela 1), objetivando encontrar a mistura que libera a maior energia. Em seguida, foi simulada uma rampa de aquecimento, de 298,15k a 648,15k, temperatura final esta que é a média de temperatura de trabalho de um motor de combustão interna utilizado por marcas de veículos (Tabela 2). Em ambas simulações, foi utilizada a pressão de 241psia, comumente utilizada por marcas de veículos. A seguir, foi simulada a utilização de frações que variaram entre 18 e 27% de etanol na gasolina, faixa esta que era utilizada -como lei- para utilização na gasolina brasileira e também uma rampa de aquecimento utilizando a fração de 27% de etanol na gasolina (Tabelas 3 e 4); fração esta que entrou em vigor em março de 2015 -lei federal- para a gasolina comum. As tabelas estão em Anexo II.

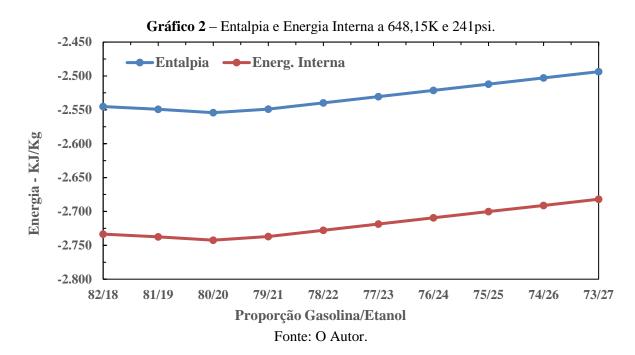
3.2 Estudo dos Dados das Simulações.

Com base nos resultados, foi possível plotar os gráficos para comparação dos dados obtidos nas simulações, sendo possível traçar diversos perfis de entalpia e emissões de gases gerados pela combustão da gasolina e do etanol. No Gráfico 1, é possível verificar que na mistura de 80% gasolina e 20% etanol, é obtida a maior liberação de entalpia, -2.554,26 KJ/Kg. Fica claro que, na medida em que se aumenta a fração de etanol após a mistura de 80/20, os valores de entalpia caem gradativamente.

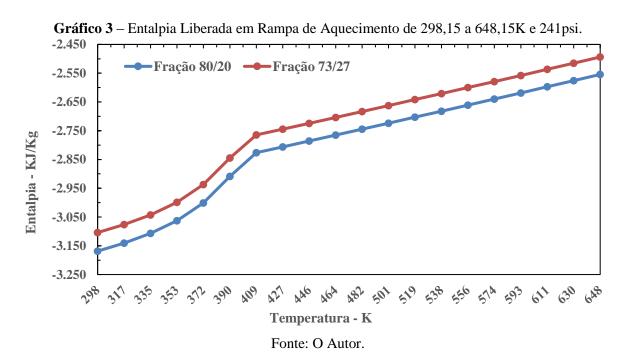


No Gráfico 2, podemos verificar que na mistura atual (requisitada pela legislação a fração 73% gasolina e 27% etanol), obteve uma menor liberação de entalpia, -2.493,74 KJ/Kg, em

torno de 2,37% a menos de energia que na fração 80/20. Se compararmos ainda a legislação anterior ao ano de 2015 que pedia a fração de 75% gasolina e 25% etanol, a redução na perda é de aproximadamente 0,73% em relação a fração 80/20.



No Gráfico 3, foi utilizada a mistura 80/20 como padrão de melhor perfil e a mistura 73/27, utilizada na legislação atual, para traçar as curvas de aquecimento de um motor de combustão interna. Ambos os gráficos apresentam o mesmo perfil separados por um delta de aproximadamente 2,3%



No Gráfico 4, observar-se a diferença de entalpia e energia interna em relação a utilização de 100% gasolina, 100% etanol, frações mais energética e atual da legislação. Os valores encontrados foram de -2.491,45 KJ/Kg para a gasolina 100% e -1.822,71 KJ/Kg para o etanol 100%, uma diferença de 27,8%. Para as frações, -2.554,26 KJ/Kg para a gasolina 80% e -2.493,74 KJ/Kg para a gasolina 73%. Todos os valores abaixo estão em módulo.

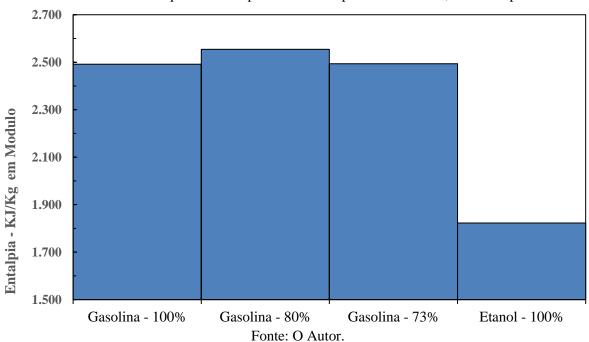


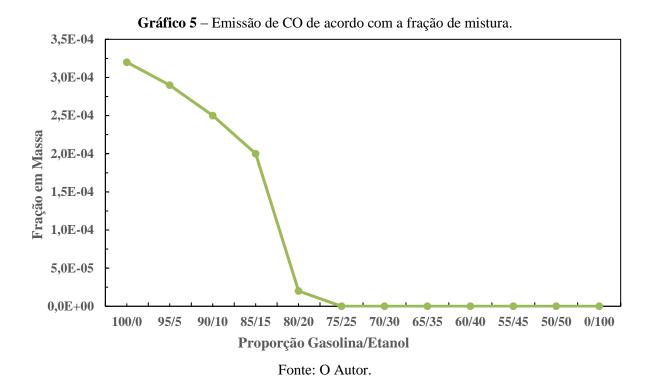
Gráfico 4 – Entalpia Liberada pela Gasolina e pelo Etanol a 648,15K e 241psi.

3.3 Emissões de Gases nas Simulações.

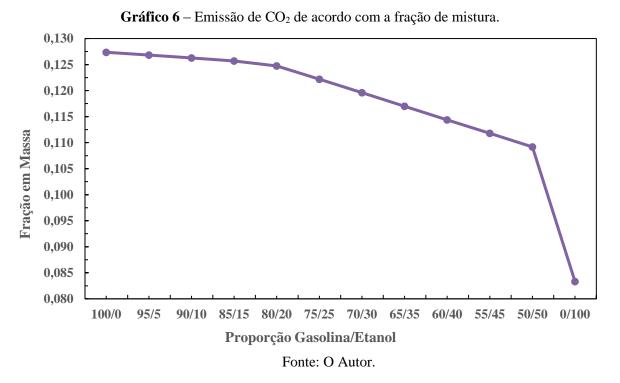
Foram analisadas as emissões dos gases para cada fração da mistura (produto da combustão), sendo possível observar qual fração foi a que menos emitiu gases poluentes. Dentre as emissões de gases, foi possível analisar o monóxido de carbono (CO₂) e metano (CH₄).

Nos Gráfico 4, 5 e 6 é possível observar que, conforme aumenta a fração de etanol na mistura, as frações de CO, CO₂ e CH₄ reduzem gradativamente.

Em relação ao CO, ao chegar na fração de 80/20, ocorre uma queda mais evidente na emissão do mesmo e ao chegar na fração 75/25, a emissão é zero, ou seja, conforme aumenta a concentração de etanol a emissão do gás se reduz.



No CO₂, a queda na emissão ocorre na utilização de 100% de Etanol.



Já com relação ao CH_4 , a mesma cessa sua emissão ao atingir a fração 80/20 (conforme aumenta a concentração de etanol).

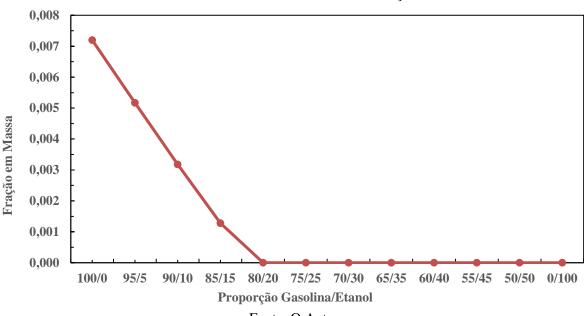


Gráfico 7 – Emissão de CH₄ de acordo com a fração de mistura.

Fonte: O Autor.

Nos Gráfico 8 e 9, observa-se o comportamento dos gases CO, CO₂ e CH₄ em relação a uma curva de aquecimento do motor, na fração 80/20.

Também é possível observar que o CO tem comportamento diferente do CH₄, pois o metano, após o início do aquecimento, tem um salto na emissão e posteriormente começa a reduzir de forma gradativa, chegando a zero ao atingir 593K. Já o monóxido de carbono tem emissão que inicia a 556K.

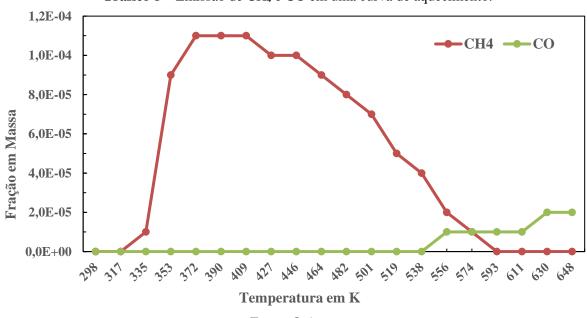


Gráfico 8 – Emissão de CH₄ e CO em uma curva de aquecimento.

Fonte: O Autor.

Em relação ao CO₂, a emissão tem início na ignição da combustão e sobe gradativamente até o termino do aquecimento.

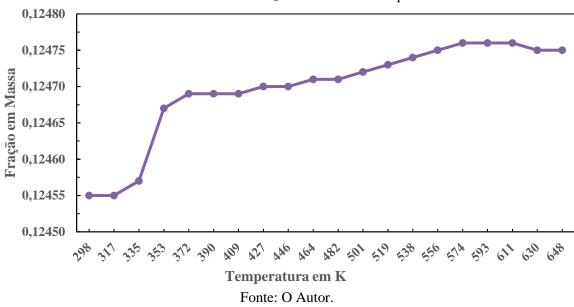


Gráfico 9 – Emissão de CO₂ em uma curva de aquecimento.

No Gráfico 10, foram comparadas as emissões de CO₂ em relação às frações 80/20 de maior liberação de energia e 73/27, que é utilizada na legislação atual. Sobre a fração de 27% de etanol na gasolina, a emissão de gases nocivos se resume apena ao dióxido de carbono. Sem a emissão de monóxido de carbono e metano, a fração em massa emitida de dióxido de carbono por esta mistura também é menor, aproximadamente 2,9% menos.

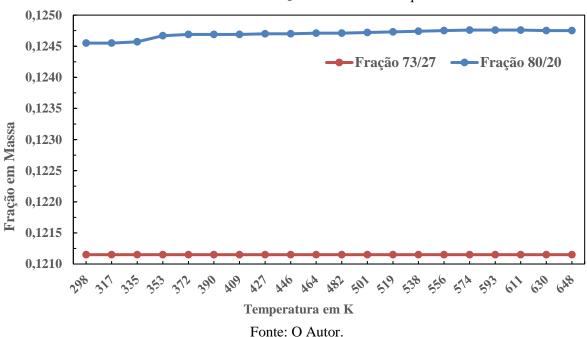


Gráfico 10 – Emissão de CO₂ em uma curva de aquecimento.

3.4 Comparativo entre as Emissões Reais e Simuladas.

Através dos dados contidos no Relatório de Emissões Veiculares do Estado de São Paulo, emitido pela CETESB [22], foi possível plotar alguns gráficos com as emissões de CO, CO₂ e CH₄ no período de 1988 a 2014. Para entender as grandes variações nos gráficos, na década de 90, começou a utilização de motores a injeção eletrônica e a partir de 2003, se iniciou a utilização de carros flex.

Nos Gráfico 11 e 12, observa-se a redução das emissões com o passar dos anos em relação a tecnologia aplicada ao desempenho do motor e ao meio ambiente.

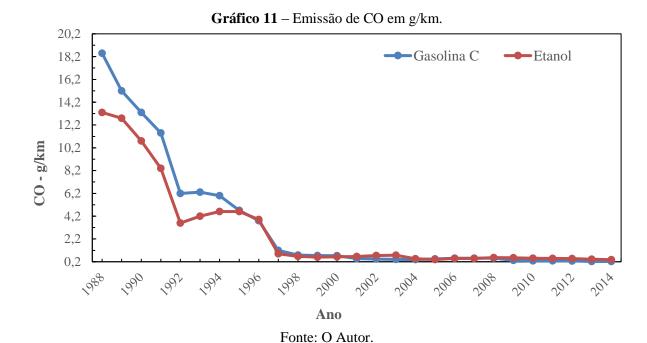
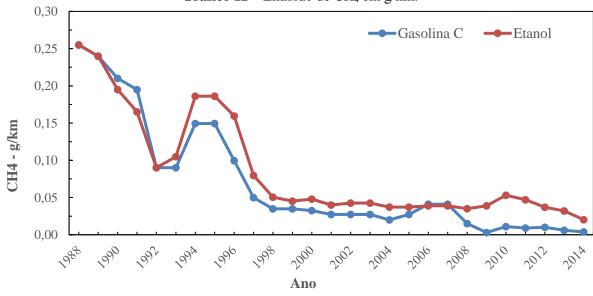
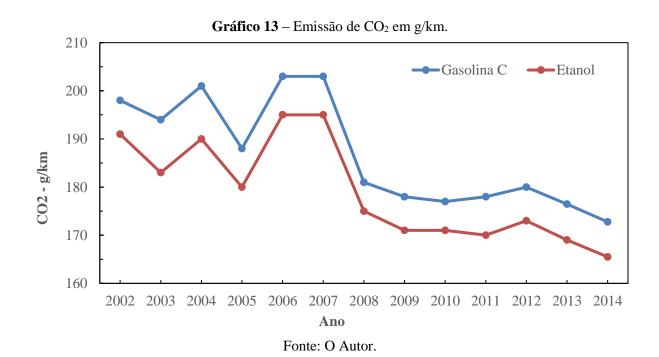


Gráfico 12 – Emissão de CH₄ em g/km.



Fonte: O Autor.

No Gráfico 13, o período de ocorrência de monitoramento de CO₂ foi a partir de 2002. Verifica-se uma queda mais acentuada em 2009, porém sem maiores reduções nos valores desde então.



Para comparar os valores coletados pela CETESB e os emitidos nas simulações, foi necessário calcular os valores de massa da queima de 1 litro de combustível, para as frações 80/20, 73/27 e 100% etanol.

3.4.1 Cálculo das Massas.

Para calcular a massa em g/km utilizando a fração em massa de saída da simulação, foram feitos os cálculos abaixo:

(1) Para uma mistura de um litro, com as frações de 80% de gasolina e 20% de etanol, foram utilizadas as densidades de 703g/L para a gasolina pura e 789g/L para o etanol. Utilizando a formula da densidade e as frações, obteve-se as respectivas massas:

$$\begin{aligned} d_{gas} &= m \ / \ V & d_{etanol} &= m \ / \ V \\ 703 &= m \ / \ (0,8 * 1) & 789 &= m \ / \ (0,2 * 1) \\ m &= 562,4g & m &= 157,8g \end{aligned}$$

(2) Em seguida, calculou-se o número de mols correspondente para esta massa, utilizando a massa molar no C_8H_{18} (gasolina pura) que corresponde a 114,23g/mol, e a massa molar do C_2H_5OH (etanol) que corresponde a 46,07g/mol.

$$n_{gas} = m \ / \ MM \qquad \qquad n_{etanol} = m \ / \ MM$$

$$n_{gas} = 562,4 / 114,23$$
 $n_{etanol} = 157,8 / 46,07$

$$n_{gas} = 4,92 mols$$
 $n_{etanol} = 3,43 mols$

(3) Através da estequiometria da reação entre a gasolina, o etanol e o oxigênio tem-se:

$$1 C_8 H_{18} + 12,5 O_2 \rightarrow 8 CO_2 + 9 H_2 O$$
 (Eq. Gasolina)
 $1 C_2 H_5 O H + 3 O_2 \rightarrow 2 CO_2 + 3 H_2 O$ (Eq. Etanol)
 $1 C_8 H_{18} + 1 C_2 H_5 O H + 15,5 O_2 \rightarrow 10 CO_2 + 12 H_2 O$ (Eq. Da Mistura)

(4) Foi calculado o número de mols do oxigênio para a gasolina:

$$1 C_8 H_{18} + 12,5 O_2 \rightarrow 8 CO_2 + 9 H_2 O$$

 $4,92 C_8 H_{18} + (4,92*12,5 = 61,5) O_2 \rightarrow (4,92*8 = 39,36) CO_2 + (4,92*9 = 44,28) H_2 O_2 + (4,92*9 = 44,28$

(5) Calculou-se o número de mols do oxigênio para a etanol:

$$1 C_2H_5OH + 3 O_2 \rightarrow 2 CO_2 + 3 H_2O$$

3,43 $C_2H_5OH + (3,43 * 3 = 10,29) O_2 \rightarrow (3,43 * 2 = 6,86) CO_2 + (3,43 * 3 = 10,29) H_2O$

(6) Foi somado o número de mols para cada reação:

Total de mols = 71,79mols

(7) Para calcular a massa de ar, utilizou-se o número de mols total de O2, considerando a fração de oxigênio no ar em 0,21 e a de nitrogênio em 0,79:

$$m_{oxig\hat{e}nio} = n_{oxig\hat{e}nio} * MM_{oxig\hat{e}nio}$$

$$m_{\text{oxigênio}} = 71,79 * 31,99$$

$$m_{\text{oxigênio}} = 2.296,56g (21\% \text{ do ar})$$

$$m_{ar} = m_{oxig\hat{e}nio} * X_{ar} / X_{oxig\hat{e}nio}$$

$$m_{ar} = 2.296,56 * 1 / 0,21$$

$$m_{ar} = 10.936g$$

(8) Somando a massa do ar, do etanol e da gasolina, obteve-se a massa total da queima de 1 litro de combustível na fração 80/20.

 $m_{total} = m_{entanol} + m_{gasolina} + m_{ar} \label{eq:mtotal}$

 $m_{total} = 157.8g + 564.4g + 10.936g$

 $m_{total} = 11.658,2g$

Para o cálculo de uma mistura de um litro, com as frações de 73% de gasolina e 27% de etanol, foi feito o mesmo procedimento desde o item 1 até o item 8, resultando em massa total de 11.394,1g.

Para o cálculo da queima de um litro de etanol a 100%, foi feito o mesmo procedimento desde o item 1 ao 3; do 5 ao 8, foi obtido uma massa total de 8.615,6g.

Após a obtenção das massas, foi possível calcular as massas dos gases de saída das simulações. Nas tabelas 5, 6 e 7, a coluna "X_{gases}" contém os valores das frações dos gases na simulação. Na coluna "Simulação", foram divididos os valores encontrados em g/L pela autonomia média em km/L relatada pela CETESB segundo o Relatório de Emissões Veiculares do Estado de São Paulo, sendo para a gasolina 12,6km/L e para o etanol 9,2km/L. Na coluna "CETESB", foram utilizadas as médias das emissões no período de 2012 a 2014 (o padrão utilizado pela CETESB é de 78% de gasolina e 22% de etanol) [22]. Os gases utilizados nas comparações foram o CO, CO₂ e CH₄.

Tabela 5 – Fração de 80% gasolina e 20% de etanol.

Gases	v	Simulado	CETESB
Gases	$X_{ m gases}$	g/km	g/km
CH_4	0,00000	0,000	0,007
CO	0,00002	0,019	0,241
CO_2	0,12475	116,0	176,0

Fonte: O Autor.

Tabela 6 – Fração de 73% gasolina e 27% de etanol.

	a' 1 1 CETEUD		
Gases	X_{gases}	Simulado	CETESB
Gases		g/km	g/km
CH ₄	0,00000	0,00	0,007
CO	0,00000	0,00	0,241
CO_2	0,12115	111	176,0

Fonte: O Autor.

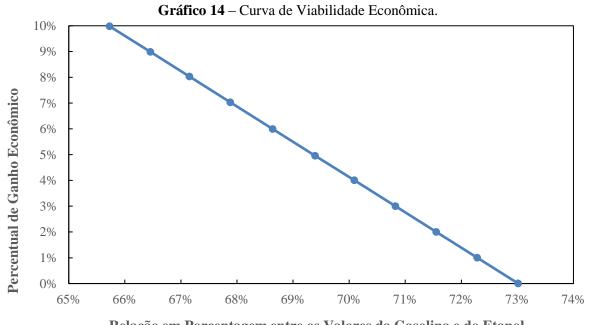
Tabela 5 - 100% de etanol.

		20000200	10070 00 00011011	
	Gases X _{gas}	v	Simulado	CETESB
		$\Lambda_{ m gases}$	g/km	g/km
	CH_4	0,00000	0,0	0,030
	CO	0,00000	0,0	0,427
	CO_2	0,08331	78	169,0

Fonte: O Autor.

3.5 Viabilidade Econômica.

Hoje, a porcentagem de etanol na gasolina é de 27%. Com esta porcentagem, a energia liberada da gasolina, em comparação a energia liberada do etanol, é possível relacionar a porcentagem máxima de diferença de preço entre a gasolina e o etanol, que será de 73%, ou seja, o valor máximo do litro do etanol não pode passar de 73% do valor do litro da gasolina para que não haja perda econômica, sendo possível -neste percentual- a utilização tanto da gasolina quanto do etanol. Abaixo desta porcentagem, há o ganho financeiro na troca da utilização da gasolina pelo etanol, conforme Gráfico 14.



Relação em Porcentagem entre os Valores da Gasolina e do Etanol

Fonte: O Autor.

Um cidadão que supostamente percorre em média 1.500km por mês utilizando gasolina, com um percentual de ganho de 10%, pode economizar em um ano em torno de R\$ 471,44.

Para se calcular as porcentagens descritas no Gráfico 14, foram utilizados os cálculos descritos no Anexo III.

4 CONCLUSÃO

O modelo matemático computacional criado por Sanford Gordon e Bonnie J. McBride, apresentou resultados bem próximos aos valores reais que são descritos nas análises de gases executadas pela CETESB. Considerando ainda que, em análises reais, os combustíveis e oxidantes não são 100% puros, sempre haverão pequenas diferenças em modelos de simulação computacional.

Em relação à energia liberada nas reações de combustão, fica claro que a utilização da mistura de 80% de gasolina com 20% de etanol tem uma maior liberação de energia, 2,37% mais energia liberada em comparação à mistura em vigor atualmente, que é de 73% de gasolina e 27% de etanol, por conseguinte, um maior rendimento para o motor. Em contrapartida, a mistura de 80/20 libera mais gases poluentes como o monóxido e o dióxido de carbono, se comparada com a mistura 73/27. Utilizando uma média anual de quilometragem percorrida de 15.000 km, a mistura 80/20, um único carro libera para a atmosfera em torno de 285g de CO e 1.740 toneladas de CO₂. Seguindo o mesmo critério anterior, a mistura 73/27 liberará 1.660 toneladas, em torno de 80 toneladas a menos de CO₂, ou seja, 4,6% menos poluentes. Sendo a mistura de 73% de gasolina e 27% de etanol, a menos poluente.

Economicamente, ao comparar a utilização da mistura de 73% de gasolina e 27% de etanol com a utilização de 100% de etanol, foi possível chegar a um valor limite de relação de preço entre a gasolina e o etanol. Uma vez que o percentual entre os dois estiver em torno de 73%, não haverá perda ou ganho na utilização da gasolina e do etanol. Abaixo desde percentual, começa a se obter ganho econômico na utilização do etanol.

REFERÊNCIAS

- [1] OMETTO, J. G. S. **O álcool combustível e o desenvolvimento sustentável.** São Paulo: PIC, 1998. 80p.
- [2] BAIRD, C.; CANN, M. Química Ambiental. 4.ed. Porto Alegre: Bookman, 2011. 844p.
- [3] PEREIRA, M. J. S. **Meio Ambiente & Tecnologia.** Rio de Janeiro: Ciência Moderna Ltda, 2010. 256p.
- [4] MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE. **PROCONVE: Programa de Controle de Poluição do Ar por Veículos Automotores.** 2011. Disponível em: http://www.mma.gov.br/images/arquivo/80060/manual%20proconve%20promot.pdf Acesso em: 27 set. 2016.
- [5] EPA. **Environmental Protection Agency.** 2016. Disponível em: https://nepis.epa.gov/Exe/ZyPDF.cgi?Dockey=P100O9ZJ.pdf Acesso em: 27 set. 2016.
- [6] PORTAL BRASIL. **Meio Ambiente Acordos Globais.** 2012. Disponível em: http://www.brasil.gov.br/meio-ambiente/2012/01/acordos-globais Acesso em: 30 mai. 2016.
- [7] MINISTERIO DO MEIO AMBIENTE. **Convenção da Nações Unidas.** Disponível em: http://www.mma.gov.br/clima/convencao-das-nacoes-unidas/acordo-de-paris Acesso em: 30 mai. 2016.
- [8] PLUME LABS. **Explore And Predict Air Quality In Your City.** Disponível em: https://plumelabs.com Acesso em: 18 abr. 2016.
- [9] ANDRADE, F. S. **A Solução Brasileira:** História do Desenvolvimento do Motor a Álcool no DCTA. São José dos Campos: SindCT, 2012. 175p.
- [10] ABIMAQ. **Associação Brasileira da Industria de Maquinas e Equipamentos.** Disponível em: http://www.abimaq.org.br/solucoes_tecnicas_imagens/etanol/diapro_2.jpg Acesso em: 15 out. 2016.
- [11] SERQUIMICA. **Fluxograma de Processo de Açúcar e Álcool.** Disponível em: http://www.serquimica.com.br/downloads/fluxograma_proc_apl_tec_serquimica.jpg Acesso em: 15 out. 2016.
- [12] LIMA, U. A. **Biotecnologia Industrial:** Processos Fermentativos e Enzimáticos. 1.ed. São Paulo: Blucher, 2001. 593p.
- [13] FARAH, M. A. **Petróleo e seus Derivados:** definição, constituição, aplicação, especificações, características de qualidade. Rio de Janeiro: LTC, 2012. 261p.
- [14] SZKLO, A. S.; ULLER, V. C. **Fundamentos do Refino do Petróleo:** tecnologia e economia. 2.ed. Rio de Janeiro: Interciência, 2008. 285p.

- [15] UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ. **Curso de Formação de Operadores de Refino: Processo de Refino.** 2002. Disponível em: http://www.tecnicodepetroleo.ufpr.br/ apostilas/petrobras/processos_de_refino.pdf> Acesso em: 20 set. 2016.
- [16] QUELHAS, A. D. et al. **Processamento de Petróleo e Gás:** petróleo e seus derivados, processamento primário, processo de refino, petroquímica, meio ambiente. Rio de Janeiro: LTC, 2011. 266p.
- [17] MARIANO, J. B. **Impactos Ambientais do Refino de Petróleo.** 2001. 216 f. Tese (Mestrado em Ciências em Planejamento Energético) UFRJ, COPPE, Rio de Janeiro, 2001.
- [18] OBERT, E. F. Motores de Combustão Interna. Porto Alegre: Globo, 1971. 618p.
- [19] TERMODINÂMICA ECCI. **Site voltado a Física dos Fluídos e Termodinâmica.** Disponível em: https://termodinamicaecci.wordpress.com/tercer-corte/ciclostermodinamicos/ciclo-de-otto/> Acesso em: 10 set. 2016.
- [20] NASA. Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications I Analysis. 1994. Disponível em: http://www.grc.nasa.gov/www/CEAWeb/RP-1311.htm Acesso em: 24 abr. 2016.
- [21] NASA. **CEARUM.** Disponível em: < https://cearun.grc.nasa.gov/> Acesso em: 24 abr. 2016.
- [22] CETESB. **Emissões Veiculares no Estado de São Paulo.** 2015. Disponível em: http://veicular.cetesb.sp.gov.br/relatorios-e-publicacoes/ Acesso em: 25 ago. 2016.

Anexo I

De: Atendimento Web < atendimentoweb@caoamontadora.com.br>

Enviado: segunda-feira, 2 de maio de 2016 10:46

Para: Fábio Silva Assunto: RES: Informação

Prezado Sr. Fabio,

Agradecemos o contato com a Central de Relacionamento Hyundai CAOA.

Acusamos o recebimento do seu e-mail em 01/05/2016, para o seu atendimento foi emitido o número de protocolo 932202.

Após recepcionarmos seu e-mail, entramos em contato com nossa rede de concessionárias para verificar as informações. Em resposta ao seu questionamento informamos que a pressão média de compressão de um motor 1.0 17 kl por cm ou 241 psi - compressão de cilindro, taxa de compressão 12,5 e motor 1.8 10,3 taxa de compressão - compressão de cilindro 185 psi.

A temperatura média de ignição é entre 300 á 400 °C, no entanto informamos que esses dados podem variar a cada modelo de veículo.

Caso tenha alguma dúvida orientamos que consulte a nossa rede de concessionárias.

Para localizar a concessionária mais próxima, por favor, acesse o link https://hyundai-

motor.com.br/concessionarias.

Concessionárias Hyundai

hyundai-motor.com.br

Encontre a Concessionária Hyundai mais próxima de você e conte com o tratamento qualificado do Grupo CAOA no Brasil. Acesse a página de Concessionária!

A Central de Relacionamento Hyundai CAOA fica à disposição para quaisquer esclarecimentos que se façam necessários.

Atenciosamente,

Central de Relacionamento Hyundai CAOA

0800 770 3355

atendimentoweb@caoamontadora.com.br

Anexo II **Tabela 1** – Energia Liberada, Frações de 100 a 50% - 648,15K e 241psi

		,		<u> </u>
Fração	Entalpia KJ/Kg	Temperatura K	CP KJ/Kg.K	U - KJ/Kg
100/0	-2491,45	648,15	1,2988	-2.679,79
95/5	-2505,68	648,15	1,2874	-2.694,05
90/10	-2520,15	648,15	1,2716	-2.708,55
85/15	-2535,22	648,15	1,2453	-2.723,61
80/20	-2554,26	648,15	1,1708	-2.742,41
75/25	-2512,12	648,15	1,1690	-2.700,30
70/30	-2466,16	648,15	1,1678	-2.654,41
65/35	-2420,20	648,15	1,1667	-2.608,53
60/40	-2374,24	648,15	1,1655	-2.562,64
55/45	-2328,28	648,15	1,1643	-2.516,75
50/50	-2282,32	648,15	1,1631	-2.470,86
0/100	-1822,71	648,15	1,1513	-2.011,98

Fonte: O Autor.

Tabela 2 – Energia Liberada, rampa de aquecimento a 241psi

		1	
Entalpia	Temperatura K	CP KJ/Kg.K	Energ. Interna
-3168,63	298,15	1,4322	-3.242,64
-3140,54	316,57	1,6416	-3.219,39
-3106,94	334,99	2,0504	-3.191,03
-3062,91	353,41	2,8045	-3.153,07
-3001,25	371,83	4,0307	-3.099,00
-2908,71	390,25	6,2248	-3.016,95
-2826,36	408,67	1,0996	-2.944,97
-2806,06	427,09	1,1049	-2.930,01
-2785,66	445,51	1,1105	-2.914,95
-2765,15	463,93	1,1164	-2.899,79
-2744,53	482,35	1,1226	-2.884,52
-2723,79	500,77	1,1289	-2.869,13
-2702,94	519,19	1,1352	-2.853,63
-2681,97	537,61	1,1412	-2.838,02
-2660,90	556,03	1,1462	-2.822,30
-2639,75	574,45	1,1504	-2.806,50
-2618,52	592,87	1,1546	-2.790,62
-2597,21	611,29	1,1595	-2.774,65
-2575,80	629,71	1,1650	-2.758,59
-2554,26	648,13	1,1708	-2.742,41

Fonte: O Autor.

Tabela 3 – Energia Liberada, Frações de 18 a 27% - 648,15K e 241psi

Fração	Entalpia KJ/Kg	Temperatura K	CP KJ/Kg.K	U - KJ/Kg
82/18	-2545,24	648,15	1,2107	-2.733,56
81/19	-2549,24	648,15	1,1880	-2.737,51
80/20	-2554,26	648,15	1,1708	-2.742,41
79/21	-2548,89	648,15	1,1700	-2.737,01
78/22	-2539,70	648,15	1,1697	-2.727,83
77/23	-2530,51	648,15	1,1695	-2.718,66
76/24	-2521,31	648,15	1,1693	-2.709,48
75/25	-2512,12	648,15	1,1690	-2.700,30
74/26	-2502,93	648,15	1,1688	-2.691,12
73/27	-2493,74	648,15	1,1686	-2.681,95

Fonte: O Autor.

Tabela 4 – Energia Liberada, rampa de aquecimento a 241psi

Entalpia KJ/Kg	Temperatura K	CP KJ/Kg.K	U - KJ/Kg
-3104,05	298,15	1,4291	-3.178,27
-3076,03	316,57	1,6383	-3.155,10
-3042,50	334,99	2,0435	-3.126,82
-2998,77	353,41	2,7723	-3.089,16
-2937,13	371,83	4,0338	-3.035,13
-2844,50	390,25	6,2326	-2.953,02
-2764,81	408,67	1,0977	-2.883,48
-2744,54	427,09	1,1026	-2.868,56
-2724,19	445,51	1,1075	-2.853,55
-2703,74	463,93	1,1126	-2.838,46
-2683,20	482,35	1,1178	-2.823,26
-2662,56	500,77	1,1231	-2.807,97
-2641,82	519,19	1,1285	-2.792,59
-2620,99	537,61	1,134	-2.777,10
-2600,05	556,03	1,1396	-2.761,50
-2579,00	574,45	1,1453	-2.745,81
-2557,85	592,87	1,1511	-2.730,01
-2536,59	611,29	1,1569	-2.714,10
-2515,23	629,71	1,1627	-2.698,09
-2493,74	648,13	1,1686	-2.681,95

Fonte: O Autor.

Anexo III

Para podermos calcular a porcentagem máxima dentre a gasolina e o etanol, seguimos o cálculos abaixo:

(1) Para encontrar o valor máximo do etanol em relação a gasolina, utilizamos os valores de autonomia citados anteriormente (SETESB), sedo para a gasolina 12,6Km/L e para o etanol 9,2Km/L, e um valor de custo para a gasolina que pode ser um valor qualquer, neste caso vamos utilizar R\$ 3,30.

$$$$_{\text{etanol}} = ($$_{\text{gasolina}} / \text{Aut.}_{\text{gasolina}}) * \text{Aut.}_{\text{etanol}}$$$$

$$$$$_{\text{etanol}} = (3,30 / 12,6) * 9,2$$

$$$$$$$$$$$$$$_{\text{etanol}} = R$ 2,41$$

(2) Em seguida calculamos a relação máximo em porcentagem entre a gasolina e o etanol.

$$\%_{\text{máximo}} = 1 - ((\$_{\text{gasolina}} - \$_{\text{etanol}}) / \$_{\text{gasolina}})$$
 $\%_{\text{máximo}} = 1 - ((3,30 - 2,41) / 3,30)$
 $\%_{\text{máximo}} = 0,730 \text{ ou } 73,0\%$

(3) Para encontrar as relações máximas de acordo com o percentual de ganho, sendo neste exemplo utilizado 5%, foi utilizado o seguinte cálculo:

$$\begin{split} \$_{etanol} &= ((\$_{gasolina} \, / \, Aut._{gasolina}) \, / \, Aut._{etanol}) - (((\$_{gasolina} \, / \, Aut._{gasolina}) \, / \, Aut._{etanol}) * \, \%_{ganho}) \\ \$_{etanol} &= ((3,30 \, / \, 12,6) \, / \, 9,2) - (((3,30 \, / \, 12,6) \, / \, 9,2) * \, 0,05) \\ \$_{etanol} &= R\$ \, 2,29 \end{split}$$

Em seguida, utilizamos o mesmo calculo descrito no item (2):

$$\%_{\text{máximo}} = 1 - ((\$_{\text{gasolina}} - \$_{\text{etanol}}) / \$_{\text{gasolina}})$$
 $\%_{\text{máximo}} = 1 - ((3,30 - 2,29) / 3,30)$
 $\%_{\text{máximo}} = 0,694 \text{ ou } 69,4\%$

Repetimos os cálculos descritos no item (3), para os valores de porcentagem de 1% a 10%

Anexo IV

De: EPA Office of Transportation & Air Quality < OTAQ@epa.gov>
Enviado: quinta-feira, 13 de outubro de 2016 11:17

Para: Fábio Silva

Assunto: RE: Your EPA Inquiry RE: Graduation project (Chemistry Engineering)

Dear Mr. Silva

Thank you for your response. It sounds like you are looking for the greenhouse gas emission standards for light-duty cars and light-duty trucks. EPA and the Department of Transportation's National Highway Traffic Safety Administration (NHTSA) jointly established a national program consisting of greenhouse gas emission standards and fuel economy standards for passenger cars, light-duty trucks, and medium-duty passenger vehicles. The Phase 1 standards applied to model years 2012 through 2016 and the Phase 2 standards will apply to model years 2017-2025. You can find the emission standards in the Code of Federal Regulations (CFR), but additional information on these rules is available on our web site at www.epa.gov/otag/climate/regs-light-duty.htm.

In addition, there are private companies/organizations that create their own emission standards guides. Two of them are Delphi (https://delphi.com/manufacturers/auto/powertrain/) and DieselNet (www.dieselnet.com/standards/). Please note that we are providing these links for your reference only. In doing so, EPA does not endorse any non-government web sites (or the information they contain), companies, or applications. In addition, EPA cannot attest to the accuracy of non-EPA information provided on these third-party web sites.

We hope this information is helpful. Thank you for contacting the Office of Transportation and Air Quality.

Sincerely

Jennifer France

Public Information Services Team Office of Transportation and Air Quality U.S. Environmental Protection Agency

Anexo V

```
out 15, 2016 06:49 PM
FileEditor:PrimeiroTeste2.out
        NASA-GLENN CHEMICAL EQUILIBRIUM PROGRAM CEA2, MAY 21, 2004
                   BY BONNIE MCBRIDE AND SANFORD GORDON
     REFS: NASA RP-1311, PART I, 1994 AND NASA RP-1311, PART II, 1996
 -----
problem
         t, k=298.15, 316.57, 334.99, 353.41, 371.83, 390.25, 408.67, 427.09, 445.51, 463.
     tp
 93, 482.35, 500.77, 519.19, 537.61, p,psia=241,
 react
   fuel-C8H18(L), isooct wt-0.73 t, k-298.15
  fuel-C2H5OH(L) wt-0.27 t,k-298.15
oxid-Air wt-13.89 t,k-298.15
end
OPTIONS: TP-T HP-F SP-F TV-F UV-F SV-F DETN-F SHOCK-F REFL-F INCD-F RKT-F FROZ-F EQL-F IONS-F SIUNIT-T DEBUGF-F SHKDBG-F DETDBG-F TRNSPT-F
 T.K = 298.1500 316.5700 334.9900 353.4100 371.8300 390.2500 408.6700
 T.K = 427.0900 445.5100 463.9300 482.3500 500.7700 519.1900 537.6100
 TRACE= 0.00E+00 S/R= 0.000000E+00 H/R= 0.000000E+00 U/R= 0.000000E+00
P,BAR = 16.616300
   REACTANT
                     WT.FRAC (ENERGY/R), K TEMP, K DENSITY
        EXPLODED FORMULA
F: C8H18(L),1soct 0.730000 -0.311696E+05 298.15 0.0000
C 8.00000 H 18.00000
N 1.56168 O 0.41959 AR 0.00937 C 0.00032
 SPECIES BRING CONSIDERED IN THIS SYSTEM (CONDENSED PHASE MAY HAVE NAME LISTED SEVERAL TIMES)
  LAST thermo.inp UPDATE: 9/09/04
  g 3/98 *Ar
                          g 7/97 *C
                                                   tpis79 *CH
                       g 4/02 CH3
g 8/99 CH4
g 8/99 +CN
g 9/99 +CO2
 g 4/02 CH2
g 7/00 CH30
                                                    g11/00 CH20H
                                                    g 7/00 CH3OH
  ard 01 CH300H
                                                    g12/99 CNN
  tp1s79 *CO
                                                    tp1s91 COOH
  tp1s91 *C2
                           g 6/01 C2H
                                                    g 1/91 C2H2, acetylene
                                                  g 3/02 O(CH)20
  g 5/01 C2H2, vinylidene g 4/02 CH2CO, ketene
                                                  g 9/00 CH3CN
g 8/88 C2H4O, ethylen-o
ard 01 OHCH2COOH
 g 6/96 CH3CO, acety1
                           g 7/01 C2H3, vinyl
                           g 1/00 C2H4
  g 8/88 CH3CHO, ethanal g 6/00 CH3COOH
                  g 7/00 C2H6
g 7/00 CH3OCH3
tp1s91 CNC
                                                  g 8/88 CH3N2CH3
srd 01 CH3O2CH3
srd 01 OCCN
  g 7/00 C2H5
  g 8/88 C2H5OH
  g 7/00 CCN
                                                          1
```

out 15, 2016 06:49 PM FileEditor:PrimeiroTeste2.out tp1s79 C2N2 g 8/00 C20 tpis79 *C3 n 4/98 C3H3,2-propyn1 g 2/00 C3H4,allene n 4/98 C3H3, 1-propvn1 C3H4, cyclo-C3H6, cyclo-C3H4, propyne g 5/90 g 3/01 C3H5, ally1 g 1/00 g 2/00 g 6/01 g 1/00 C3H6, propylene C3H6O, propylox C3H6O, propanal C3H7, n-propy1 C3H6O, acetone g 7/01 g 6/97 g 1/02 g 2/00 g 9/85 C3H7, 1-propy1 g 2/00 CNCOCN C3H8 C3H8O, 1propanol g 2/00 C3H8O, 2propanol srd 01 g 7/88 C302 g 8/00 C4H4,1,3-cyclog tpis g 7/01 C4H2, butadiyne n10/92 C4H6, butadiene n10/93 C4H6, 1butyne n10/93 C4H6,2butyne n 4/88 C4H8, 1-butene n 4/88 C4H8.c1s2-buten g 8/00 C4H6.cvclon 4/88 C4H8,tr2-butene n 4/88 C4H8,1sobutene C4H8, cyclo-(CH3COOH) 2 C4H9, s-butyl C4H9, n-butyl C4H9, t-butyl g10/00 n10/84 n10/84 C4H9.1-butv1 g 1/93 g12/00 C4H10, n-butane g 8/00 C4H10, isobutane g 6/01 C4N2 g 8/00 *C5 g 5/90 C5H6,1,3cyclo- g 1/93 g 2/01 C5H10,cyclo- n10/84 C5H8, cyclon 4/87 C5H10, 1-pentene C5H11, pentyl C5H11, t-pentyl n10/85 C5H12, n-pentane n10/85 C5H12, 1-pentane n10/85 CH3C (CH3) 2CH3 g11/00 C6H5, phenyl C6H5OH, phenol g 2/93 g 8/00 C6H5O, phonoxy C6H6 g 8/00 C6H12,1-hexene g 6/90 g 8/00 C6H6 g 1/93 C6H10, cyclo-C6H12, cyclon 4/87 n10/83 C6H13, n-hexyl g 6/01 C6H14, n-hexane g 7/01 C7H80, cresol-mx n 4/87 g 1/93 C7H7, benzyl C7H8 C7H14,1-heptene n10/83 C7H15,n-heptyl C7H16,2-methylh n 4/89 C8H8,styrene g12/00 C7H16, n-heptane n10/85 n10/85 C8H16,1-octane n10/83 C8H18,1sooctane n10/83 n10/86 C8H10,ethylbenz n 4/87 n10/83 C8H17, n-octv1 C8H18, n-octane n 4/85 C9H19, n-nonyl n 4/85 g 3/01 C10H8, naphthale n10/83 C10H21, n-decyl g 8/00 C12H9, o-bipheny q 8/00 C12H10, biphenyl q 6/97 *H g 6/01 HCN g 1/01 tpis89 HCCN g 6/01 g 6/01 HNC g 7/00 HNCO g 5/99 HNO3 g10/01 HNO HNO2 g 4/02 tp1s89 HO2 g 5/01 HCHO, formaldehy g 6/99 H2O2 tpis78 *82 HCHO, formaldehy g 6/01 нсоон g 8/89 H2O g 6/01 (HCOOH)2 g 6/01 NCO g 5/97 *N g 4/99 tpis89 NH2OH g 3/01 NH2 tpis89 NH3 g 4/99 NO2 g 6/01 NCN g 4/99 N2H4 tp1s89 *NO 112/64 NO3 g 5/99 N2H2 tp1s78 *N2 tpis89 NH2NO2 q 4/99 N20 g 4/99 N2O3 tp1s89 N2O4 g 4/99 N205 tpis89 N3 q 4/02 *OH g 4/99 N3H g 5/97 *0 tp1s89 *02 g 8/01 03 n 4/83 C(gr) n 4/83 C(gr) n 4/83 C(gr) q 8/01 H2O(L) g11/99 H2O(CE) g 8/01 H2O(L) O/F = 13.890000 EFFECTIVE FUEL EFFECTIVE OXIDANT MIXTURE h(2)/R h(1)/R h0/R -0.52123615E+00 -0.27001380E+02 (KG-MOL)(K)/KG -0.39481058E+03 KG-FORM. WT. /KG b1(1) 0.62847276E-01 0.11013248E-04 0.42310444E-02 *H 0.15019764E+00 0.00000000E+00 0.10087148E-01 0.58608453E-02 0.14486046E-01 0.13906785E-01 *N 0.0000000E+00 0.53915890E-01 0.50294944E-01 0.00000000E+00 0.32331996E-03 *Ar 0.30160606E-03 С POINT ITN T

2

FileEditor:PrimeiroTeste2.out

		AR				
1	34	298.150	-156.729	-52.937	-13.512	-10.282
		-20.5€	5			
ADD	H20(L)					
1	4	298.150	-156.729	-55.140	-13.435	-10.205
		-20.41	1			
2	3	316.570	-147.494	-51.791	-13.439	-10.209
		-20.41	.9			
3	3	334.990	-139.278	-48.821	-13.452	-10.222
		-20.43	19			
4	4	353.410	-131.922	-46.168	-13.472	-10.242
		-20.47	12			
5	4	371.830	-125.298	-43.784	-13.503	-10.273
		-20.52	15			
6	4	390.250	-119.302	-41.627	-13.549	-10.318
		-20.60	15			
7	4	408.670	-113.849	-39.662	-13.616	-10.385
		-20.72	26			
REMO	VE H20	(L)				
7	3	408.670	-113.849	-39.798	-13.591	-10.360
		-20.67	17			
8	1	427.090	-108.869	-38.278	-13.614	-10.382
		-20.70	19			

THERMODYNAMIC EQUILIBRIUM PROPERTIES AT ASSIGNED

TEMPERATURE AND PRESSURE

CASE -

	REACTANT	WT FRACTION	ENERGY	TEMP
		(SEE NOTE)	KJ/KG-MOL	K
FUEL	C8H18(L), isouct	0.7300000	-259160.000	298.150
FUEL	C2H5OH(L)	0.2700000	-277510.001	298.150
OXIDANT	Air	1.0000000	-125.530	298.150

O/F= 13.89000 %FUEL= 6.715917 R,EQ.RATIO= 0.971156 PHI,EQ.RATIO= 0.970271

THERMODYNAMIC PROPERTIES

P, BAR	16.616	16.616	16.616	16.616	16.616	16.616	16.616	16.616
T, K	298.15	316.57	334.99	353.41	371.83	390.25	408.67	427.09
RHO, KG/CU M	2.2389 1	2.1015 1	1.9706 1	1.8384 1	1.6956 1	1.5313 1	1.4002 1	1.3398 1
H, KJ/KG	-3104.05	-3076.03	-3042.50	-2998.77	-2937.13	-2844.50	-2764.81	-2744.54
U, KJ/KG	-3178.27	-3155.10	-3126.82	-3089.16	-3035.13	-2953.02	-2883.48	-2868.56
G, KJ/KG	-4773.40	-4877.36	-4983.10	-5090.92	-5201.45	-5315.71	-5434.81	-5555.61
S, KJ/(KG)(K)	5.5990	5.6902	5.7930	5.9199	6.0896	6.3324	6.5334	6.5819
M, (1/n)	33, 403	33.289	33.032	32.510	31.548	29.902	28,633	28.633
MW, MOL WT	28,633	28.633	28.633	28,633	28.633	28.633	28.633	28.633
(dLV/dLP)t	-1.00191	-1.00534	-1.01317	-1.02941	-1.06082	-1.11919	-1.00000	-1.00000
(dLV/dLT)p	1.0339	1.0877	1.2007	1.4173	1.8053	2.4752	1.0000	1.0000
Cp, KJ/(KG)(K)	1.4291	1.6383	2.0435	2.7723	4.0338	6.2326	1.0977	1,1026
GAMMAs	1.2259	1.2121	1.1968	1.1847	1,1794	1.1822	1.3597	1.3575

FileEditor:PrimeiroTeste2.out

SON VEL, M/SEC 301.6 309.6 317.7 327.2 340.0 358.2 401.7 410.3

MOLE FRACTIONS

*Ar 0.00864 0.00864 0.00864 0.00864 0.00864 0.00864 0.00864 0.00864 *CO2 0.12115 0.121

* THERMODYNAMIC PROPERTIES FITTED TO 20000.K

PRODUCTS WHICH WERE CONSIDERED BUT WHOSE MOLE FRACTIONS WERE LESS THAN 5.000000E-06 FOR ALL ASSIGNED CONDITIONS

*C	*CH	CH2	CH3	CH2OH
CH3O	CH4	CH3OH	CH3OOH	*CN
CNN	*00	COOH	*C2	C2H
C2H2, acetylene	C2H2, vinylidene	CH2CO, ketene	O(CH)20	HO (CO) 20H
C2H3, vinyl	CH3CN	CH3CO, acetyl	C2H4	C2H4O, ethylen-o
CH3CHO, ethanal	CH3COOH	OHCH2COOH	C2H5	C2H6
CH3N2CH3	C2H5OH	CH3OCH3	CH302CH3	CCN
CNC	OCCN	C2N2	C20	*C3
C3H3, 1-propynl	C3H3, 2-propyn1	C3H4, allene	C3H4, propyne	C3H4, cyclo-
C3H5, ally1	C3H6, propylene	C3H6, cyclo-	C3H6O, propylox	C3H6O, acetone
C3H6O, propanal	C3H7, n-propy1	C3H7, 1-propyl	C3H8	C3H8O, 1propanol
C3H8O, 2propanol	CNCOCN	C302	*C4	C4H2, butadiyne
C4H4, 1, 3-cyclo-	C4H6, butadiene	C4H6, 1butyne	C4H6, 2butyne	C4H6, cyclo-
C4H8, 1-butene	C4H8, cis2-buten	C4H8, tr2-butene	C4H8, isobutene	C4H8, cyclo-
(CH3COOH)2	C4H9, n-butyl	C4H9, 1-butyl	C4H9, s-buty1	C4H9,t-butyl
C4H10, n-butane	C4H10, isobutane	C4N2	*C5	C5H6,1,3cyclo-
C5H8, cyclo-	C5H10,1-pentene	C5H10, cyclo-	C5H11, pentyl	C5H11, t-pentyl
C5H12, n-pentane	C5H12, 1-pentane	CH3C (CH3) 2CH3	C6H2	C6H5, phenyl
C6H5O, phenoxy	C6H6	C6H5OH, phenol	C6H10, cyclo-	C6H12, 1-hexene
C6H12, cyclo-	C6H13, n-hexyl	C6H14, n-hexane	C7H7, benzyl	C7H8
C7H8O, cresol-mx	C7H14, 1-heptene	C7H15, n-heptyl	C7H16, n-heptane	C7H16, 2-methy1h
C8H8, styrene	C8H10,ethylbenz	CBH16, 1-octene	C8H17, n-octyl	C8H18, n-octane
C8H18, isooctane	C9H19, n-nonyl	C10H8, naphthale	C10H21, n-decyl	C12H9, o-bipheny
C12H10, biphenyl	*H	HCN	HCO	HCCN
HCC0	HNC	HNCO	HNO	HNO2
HNO3	HO2	*H2	HCHO, formaldehy	HCOOH
H202	(HCOOH) 2	*N	NCO	*NH
NH2	NH3	NH2OH	*NO	NO2
NO3	NCN	N2H2	NH2NO2	N2H4
N20	N203	N204	N205	N3
N3H	*0	*OH	03	C(gr)
H2O(cr)				

NOTE. WEIGHT FRACTION OF FUEL IN TOTAL FUELS AND OF OXIDANT IN TOTAL OXIDANTS

POINT ITN T C H O N

FileEditor:PrimeiroTeste2.out

AR
445.510 -104.304 -36.885 -13.638 -10.406
-20.742
463.930 -100.103 -35.605 -13.663 -10.430
-20.777
482.350 -96.226 -34.425 -13.689 -10.456
-20.813
500.770 -92.636 -33.333 -13.716 -10.482
-20.850
519.190 -89.303 -32.320 -13.743 -10.508
-20.887
537.610 -86.200 -31.378 -13.771 -10.535
-20.925 1 1 2 1 3 1 4 1 5 1 6 1

THERMODYNAMIC EQUILIBRIUM PROPERTIES AT ASSIGNED

TEMPERATURE AND PRESSURE

CASE -

	REACTANT	WT FRACTION (SEE NOTE)	ENERGY KJ/KG-MOL	TEMP K
FUEL	C8H18(L), isooct	0.7300000	-259160.000	298.150
FUEL	C2H5OH(L)	0.2700000	-277510.001	298.150
OXIDANT	Air	1.0000000	-125.530	298.150

O/F= 13.89000 %FUEL= 6.715917 R,EQ.RATIO= 0.971156 PHI,EQ.RATIO= 0.970271

THERMODYNAMIC PROPERTIES

P, BAR	16.616	16.616	16.616	16.616	16.616	16.616
T, K	445.51	463.93	482.35	500.77	519.19	537.61
RHO, KG/CU M	1.2844 1	1.2334 1	1.1863 1	1.1427 1	1.1022 1	1.0644 1
H, KJ/KG	-2724.19	-2703.74	-2683.20	-2662.56	-2641.82	-2620.99
U, KJ/KG	-2853.55	-2838.46	-2823.26	-2807.97	-2792.59	-2777.10
G, KJ/KG	-5677.28	-5799.79	-5923.12	-6047.24	-6172.11	-6297.73
S, KJ/(KG)(K)	6.6286	6.6735	6.7170	6.7589	6.7996	6.8390
M, (1/n)	28,633	28.633	28.633	28,633	28.633	28.633
MW, MOL WT	28,633	28.633	28.633	28,633	28.633	28.633
(dLV/dLP)t	-1.00000	-1.00000	-1.00000	-1.00000	-1.00000	-1.00000
(dLV/dLT)p	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Cp, KJ/(KG)(K)	1.1075	1.1126	1.1178	1.1231	1.1285	1.1340
GAMMAs	1.3554	1.3532	1.3509	1.3487	1.3465	1.3442
SON VEL, M/SEC	418.7	427.0	435.0	442.9	450.5	458.1
MOLE FRACTIONS						

*Ar	0.00864	0.00864	0.00864	0.00864	0.00864	0.00864
*C02	0.12115	0.12115	0.12115	0.12115	0.12115	0.12115
H20	0.14441	0.14441	0.14441	0.14441	0.14441	0.14441
*N2	0.72006	0.72006	0.72006	0.72006	0.72006	0.72006
*02	0.00574	0.00574	0.00574	0.00574	0.00574	0.00574

FileEditor:PrimeiroTeste2.out

* THERMODYNAMIC PROPERTIES FITTED TO 20000.K

PRODUCTS WHICH WERE CONSIDERED BUT WHOSE MOLE FRACTIONS WERE LESS THAN 5.000000E-06 FOR ALL ASSIGNED CONDITIONS

*C	*CH	CH2	CH3	CH2OH
CH30	CH4	СНЗОН	CH300H	*CN
CNN	*00	COOH	*C2	C2H
C2H2, acetylene	C2H2, vinylidene	CH2CO, ketene	O(CH)20	HO (CO) 20H
C2H3, vinyl	CH3CN	CH3CO, acetyl	C2H4	C2H4O, ethylen-o
CH3CHO, ethanal	CH3COOH	OHCH2COOH	C2H5	C2H6
CH3N2CH3	C2H5OH	CH3OCH3	CH302CH3	CCN
CNC	OCCN	C2N2	C20	*C3
C3H3, 1-propynl	C3H3, 2-propyn1	C3H4, allene	C3H4, propyne	C3H4, cyclo-
C3H5, allyl	C3H6, propylene	C3H6, cyclo-	C3H6O, propylox	C3H6O, acetone
C3H6O, propanal	C3H7, n-propy1	C3H7, 1-propy1	C3H8	C3H8O, 1propanol
C3H8O, 2propanol	CNCOCN	C3O2	*C4	C4H2, butadiyne
C4H4, 1, 3-cyclo-	C4H6, butadiene	C4H6, 1butyne	C4H6, 2butyne	C4H6, cyclo-
C4H8, 1-butene	C4H8, cis2-buten	C4H8, tr2-butene		C4H8, cyclo-
(CH3COOH) 2	C4H9, n-buty1	C4H9, 1-butyl	C4H9, s-buty1	C4H9,t-butyl
C4H10, n-butane	C4H10, isobutane	C4N2	*C5	C5H6,1,3cyclo-
C5H8, cyclo-	C5H10,1-pentene	C5H10, cyclo-	C5H11, pentyl	C5H11, t-pentyl
C5H12, n-pentane	C5H12,1-pentane	CH3C (CH3) 2CH3	C6H2	C6H5, phenyl
C6H5O, phenoxy	C6H6	C6H5OH, phenol	C6H10, cyclo-	C6H12, 1-hexene
C6H12, cyclo-	C6H13, n-hexyl	C6H14, n-hexane	C7H7, benzyl	C7H8
C7H8O, cresol-mx	C7H14, 1-heptene	C7H15, n-heptyl	C7H16,n-heptane	C7H16, 2-methy1h
C8H8, styrene	C8H10,ethylbenz	C8H16, 1-octene	C8H17, n-octyl	C8H18, n-octane
C8H18, isooctane	C9H19, n-nonyl	C10H8, naphthale	C10H21, n-decyl	C12H9, o-bipheny
C12H10, biphenyl	*H	HCN	HCO	HCCN
HCC0	HNC	HNCO	HNO	HNO2
HNO3	HO2	*H2	HCHO, formaldehy	HCOOH
H202	(HCOOH) 2	*N	NCO	*NH
NH2	NH3	NH2OH	*NO	NO2
NO3	NCN	N2H2	NH2NO2	N2H4
N20	N2O3	N204	N205	N3
N3H	*0	*OH	03	C(gr)
H2O(CF)	H2O(L)			

NOTE. WEIGHT FRACTION OF FUEL IN TOTAL FUELS AND OF OXIDANT IN TOTAL OXIDANTS

```
FileEditor:SegundoTeste2.out
                   NASA-GLENN CHEMICAL EQUILIBRIUM PROGRAM CEA2, MAY 21, 2004
                                         BY BONNIE MCBRIDE AND SANFORD GORDON
            REFS: NASA RP-1311, PART I, 1994 AND NASA RP-1311, PART II, 1996
 tp t, k=556.03,574.45,592.87,611.29,629.71,648.15 p,psia=241
 react
      fuel-C8H18(L), isooct wt-0.73 t,k-298.15
     fuel-C2H5OH(L) wt-0.27 t, k-298.15
oxid-Air wt-13.89 t, k-298.15
 OPTIONS: TP-T HP-F SP-F TV-F UV-F SV-F DETN-F SHOCK-F REFL-F INCD-F
 RKT-F FROZ-F EQL-F IONS-F SIUNIT-T DEBUCF-F SHKDBC-F DETDBC-F TRNSPT-F
                 556.0300 574.4500 592.8700 611.2900 629.7100 648.1500
 TRACE= 0.00E+00 S/R= 0.000000E+00 H/R= 0.000000E+00 U/R= 0.000000E+00
 P.BAR = 16.616300
                                               WT.FRAC (ENERGY/R), K TEMP, K DENSITY
       REACTANT
                 EXPLODED FORMULA
 F: C8H18(L),isoct 0.730000 -0.311696E+05 298.15 0.0000 C 8.00000 H 18.00000
 F: C2H5OH(L)
                                            0.270000 -0.333766E+05 298.15 0.0000
                   C 2.00000 H 6.00000 O 1.00000

1.000000 -0.150977E+02 298.15 O

N 1.56168 O 0.41959 AR 0.00937 C 0.00032
 O: Air
                                                                                                        298.15 0.0000
   SPECIES BEING CONSIDERED IN THIS SYSTEM
  (CONDENSED PHASE MAY HAVE NAME LISTED SEVERAL TIMES)
   LAST thermo.inp UPDATE: 9/09/04
                                                          g 7/97 *C
    g 3/98 *Ar
                                                                                                                   tp1s79 *CH
                                                       g 4/02 CH3
g 8/99 CH4
   g 4/02 CH2
g 7/00 CH30
                                                                                                               g11/00 CH20H
g 7/00 CH30H
                                                         g 8/99 *CN
                                                                                                                    g12/99 CNN
    ard 01 CH300H
   tpis79 *C0
tpis91 *C2
                                                           g 9/99 *CO2
                                                                                                                    tp1s91 COOH
                                                            g 6/01 C2H
                                                                                                               g 1/91 C2H2,acetylene
g 3/02 O(CH)2O
    g 5/01 C2H2, vinylidene g 4/02 CH2CO, ketene
                                                           g 7/01 C2H3, viny1
g 1/00 C2H4
                                                                                                               g 9/00 CH3CN
g 8/88 C2H4O, ethylen-o
   g 6/96 CH3CO, acetyl
    srd 01 HO(CO)20H
    g 8/88 CH3CHO, ethanal g 6/00 CH3COOH
                                                                                                                    ard 01 OHCH2COOH
   g 8/88 CH3CH0,ethanal g 6/00 CH3COOH srd 01 OHCH2COOH g 7/00 C2H5 g 7/00 C2H6 g 8/88 CH3N2CH3 g 8/88 CH3N2CH3 srd 01 CH3O2CH3 g 7/00 CCN tpis91 CNC srd 01 OCCN tpis79 C2N2 g 8/00 C20 tpis79 *C3 tpis
```

g 1/00 C3H4,propyne g 5/90 C3H4,cyclo-

1

g 3/01 C3H5,allyl

out 15, 2016 06:51 PM FileEditor:SegundoTeste2.out g 1/00 C3H6,cyclo- g 6/01 C3H6O,propylox g 1/02 C3H6O,propanal g 7/01 C3H7,n-propyl g 2/00 C3H6,propylene g 1/00 C3H6,cycloq 6/97 C3H6O, acetone CHH8 CNCOCN g 9/85 C3H7.1-propv1 g 2/00 C3H8 g 2/00 C3H8O, 1propanol g 2/00 C3H8O, 2propanol srd 01 C302 g tpis *C4 g 7/01 C4H2, butadivne g 8/00 C4H4.1.3-cvclo-*C4 C4H6,butadiene C4H6,1butyne C4H8,1-butene C4H8,1sobutene n10/93 C4H6, 2butyne n10/93 C4H6,cyclo- n 4/88 C4H8,tr2-butene n 4/88 g 8/00 n 4/88 C4H8, cis2-buten n 4/88 g 8/00 C4H8, cyclo-C4H9, n-buty1 C4H9, t-buty1 (CH3COOH)2 n10/84 C4H9,s-buty1 g 1/93 g10/00 n10/84 C4H9, 1-butyl C4H9,s-butyl g 1/93 C4H10,1sobutane g 6/01 q 1/93 q12/00 C4H10, n-butane g 8/00 *C5 n 4/87 C5H10, 1-pentene g 8/00 C4N2 C5H8, cyclog 5/90 C5H6, 1, 3cyclo- g 1/93 g 2/01 n10/84 C5H11, pentyl g 1/93 C5H11, t-pentyl C5H10, cyclon10/85 C5H12, n-pentane n10/85 C5H12,1-pentane n10/85 CH3C (CH3) 2CH3 g 2/93 C6H2 g11/00 C6H5.phenv1 g 8/00 C6H5O, phenoxy g 8/00 C6H6 g 8/00 C6H5OH, pheno1 g 1/93 C6H10, cyclon 4/87 C6H12, 1_hoxono g 6/90 C6H12, cyclon10/83 C6H13, n-hexyl g 7/01 g 6/01 C6H14, n-hexane C7H7, benzyl g 1/93 C7H8 12/00 C7H8O, cresol-mx n 4/87 C7H14,1-heptene n10/83 C7H15, n-heptyl C7H16, n-heptane n10/85 C7H16, 2-methylh n 4/89 C8H8, styrene n10/85 C8H10,ethylbenz n 4/87 C8H16, 1-octene C8H17, n-octyl n10/86 n10/83 C8H18, n-octane n 4/85 C8H18, isooctane n10/83 C10H8, naphthale n10/83 C10H21, n-decyl g 8/00 n 4/85 C9H19, n-nonvl C12H9, o-bipheny g 3/01 g 8/00 C12H10, biphenyl g 6/97 *13 g 6/01 HCN HOON HCCO g 1/01 HCO g 6/01 tp1s89 g 6/01 HNC g 7/00 HNCO g10/01 HNO tpis89 HNO2 g 5/99 HNO3 g 4/02 HO2 g 5/01 HCHO, formaldehy g 6/01 *H2 HCOOH tpis78 g 6/99 H2O2 g 6/01 NCO g 6/01 g 4/99 (HCOOH) 2 g 8/89 H2O g 5/97 *10 *NH g 3/01 NH2 tpis89 NH3 tp1s89 NH2OH tpis89 *NO g 4/99 NO2 112/64 NO3 q 6/01 NCN tp1s78 *N2 g 5/99 N2H2 tpis89 NH2NO2 g 4/99 N2H4 g 4/99 N20 g 4/99 N203 tp1s89 N2O4 g 4/99 N205 g 4/99 N3H tpis89 N3 g 5/97 g 4/02 *OH n 4/83 C(gr) tpis89 *02 n 4/83 C(gr) g 8/01 03 n 4/83 C(gr) g11/99 H2O(cr) g 8/01 H2O(L) g 8/01 H2O(L) O/F = 13.890000 EFFECTIVE FUEL EFFECTIVE OXIDANT MIXTURE ENTHALDY h(2)/R h(1)/R h0/R -0.52123615E+00 -0.39481058E+03 (KG-MOL)(K)/KG -0.27001380E+02 KG-FORM, WT. /KG b1 (2) b1 (1) b01 0.62847276E-01 0.11013248E-04 0.42310444E-02 *8 0.15019764E+00 0.00000000E+00 0.10087148E-01 0.14486046E-01 0.13906785E-01 0.58608453E-02 *0 0.00000000E+00 0.53915890E-01 0.50294944E-01 *Ar 0.00000000E+00 0.32331996E-03 0.30160606E-03 POINT ITN T C н 0 5.030 -83.305 -30.500 -13.799 -20.964 1 30 556.030 -10.562

2

FileEditor:SegundoTeste2.out

2	1	574.450 -21.002	-80.598	-29.679	-13.827	-10.589
3	1	592.870 -21.041	-78.060	-28.910	-13.855	-10.616
4	1		-75.677	-28.189	-13.884	-10.644
5	1	629.710	-73.435	-27.512	-13.912	-10.671
6	1		-71.320	-26.873	-13.941	-10.699

THERMODYNAMIC EQUILIBRIUM PROPERTIES AT ASSIGNED

TEMPERATURE AND PRESSURE

CASE -

	REACTANT	WT FRACTION (SEE NOTE)	ENERGY KJ/KG-MOL	TEMP K
FUEL	C8H18(L), isouct	0.7300000	-259160.000	298.150
FUEL	C2H5OH(L)	0.2700000	-277510.001	298.150
OXIDANT	Air	1.0000000	-125.530	298,150

O/F= 13.89000 %FUEL= 6.715917 R,EQ.RATIO= 0.971156 PHI,EQ.RATIO= 0.970271

THERMODYNAMIC PROPERTIES

P, BAR	16.616	16.616	16.616	16,616	16.616	16.616
T, K	556.03	574.45	592.87	611.29	629.71	648.15
RHO, KG/CU M	1.0291 1	9.9614 0	9.6519 0	9.3610 0	9.0872 0	8.8287 0
H, KJ/KG	-2600.05	-2579.00	-2557.85	-2536.59	-2515.23	-2493.74
U, KJ/KG						
G, KJ/KG						
S, KJ/(KG)(K)	6.8773	6.9146	6.9508	6.9861	7.0206	7.0542
M, (1/n)						
(dLV/dLP)t						
(dLV/dLT)p	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Cp, KJ/(KG)(K)						
GAMMAs						
SON VEL, M/SEC	465.5	472.7	479.8	486.8	493.7	500.4
MOLE FRACTIONS						
*Ar						
	0.12115				0.12115	
	0.14441			0.14441	0.14441	0.14441
*N2					0.72006	0.72006
*02	0.00574	0.00574	0.00574	0.00574	0.00574	0.00574

* THERMODYNAMIC PROPERTIES FITTED TO 20000.K

PRODUCTS WHICH WERE CONSIDERED BUT WHOSE MOLE FRACTIONS WERE LESS THAN 5.000000E-06 FOR ALL ASSIGNED CONDITIONS

FileEditor:SegundoTeste2.out

*C	*CH	CH2	CH3	CH2OH
CH3O	CH4	CH3OH	CH3OOH	*CN
CNN	*00	COOH	*C2	C2H
C2H2, acetylene	C2H2, vinylidene	CH2CO, ketene	O(CH)20	HO (CO) 20H
C2H3, vinyl	CH3CN	CH3CO, acetyl	C2H4	C2H4O, ethylen-o
CH3CHO, ethanal	CH3COOH	OHCH2COOH	C2H5	C2H6
CH3N2CH3	C2H5OH	CH3OCH3	CH3O2CH3	CCN
CNC	OCCN	C2N2	C20	*C3
C3H3, 1-propynl	C3H3, 2-propyn1	C3H4, allene	C3H4, propyne	C3H4, cyclo-
C3H5, ally1	C3H6, propylene	C3H6, cyclo-	C3H6O,propylox	C3H6O, acetone
C3H6O, propanal	C3H7, n-propy1	C3H7, 1-propyl	C3H8	C3H8O, 1propanol
C3H8O, 2propanol	CNCOCN	C302	*C4	C4H2, butadiyne
C4H4, 1, 3-cyclo-	C4H6, butadiene	C4H6, 1butyne	C4H6, 2butyne	C4H6, cyclo-
C4H8, 1-butene	C4H8, cis2-buten	C4H8, tr2-butene	C4H8, isobutene	C4H8, cyclo-
(CH3COOH)2	C4H9, n-butyl	C4H9, 1-butyl	C4H9, s-buty1	C4H9,t-butyl
C4H10, n-butane	C4H10, isobutane	C4N2	*C5	C5H6,1,3cyclo-
C5H8, cyclo-	C5H10, 1-pentene	C5H10, cyclo-	C5H11, pentyl	C5H11, t-pentyl
C5H12, n-pentane	C5H12, 1-pentane	CH3C (CH3) 2CH3	C6H2	C6H5, phenyl
C6H5O, phenoxy	C6H6	C6H5OH, phenol	C6H10, cyclo-	C6H12, 1-hexene
C6H12, cyclo-	C6H13, n-hexyl	C6H14, n-hexane	C7H7, benzyl	C7H8
C7H8O, creso1-mx	C7H14, 1-heptene	C7H15, n-heptyl	C7H16, n-heptane	C7H16, 2-methy1h
C8H8, styrene	C8H10,ethylbenz	C8H16, 1-octane	C8H17, n-octyl	C8H18, n-octane
C8H18, isooctane	C9H19, n-nonyl	C10H8, naphthale	C10H21, n-decy1	C12H9, o-bipheny
C12H10, biphenyl	*H	HCN	HCO	HCCN
HCC0	HNC	HNCO	HNO	HNO2
HNO3	HO2	*H2	HCHO, formaldehy	HCOOH
H202	(HCOOH) 2	*N	NCO	*NH
NH2	NH3	NH2OH	*NO	NO2
NO3	NCN	N2H2	NH2NO2	N2H4
N20	N2O3	N204	N205	N3
N3H	*0	*OH	03	C(gr)
H2O(CT)	H2O(L)			

NOTE. WEIGHT FRACTION OF FUEL IN TOTAL FUELS AND OF OXIDANT IN TOTAL OXIDANTS