

PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA  
DO RIO DE JANEIRO



**Lucas Rodine Barroso de Carvalho**

**Estudo do impacto da substituição de óleo diesel  
por hidrogênio no perfil de emissão em um veículo  
pesado**

**Projeto de Graduação**

Projeto de Graduação apresentado ao Departamento de Engenharia  
Mecânica da PUC-Rio

Orientadora: Florian Alain Yannick Pradelle  
Co-orientador: Epifanio Mamani Ticona

Rio de Janeiro  
Dezembro de 2023

## Agradecimentos

Agradeço aos meus pais, Catarina de Fátima Rodine e Geraldo Carvalho por sempre colocarem a minha formação educacional e pessoal em primeiro lugar, independente do esforço e dedicação envolvida. Agradeço ao meu irmão Thomaz Rodine por todos os momentos que dividimos e aprendemos juntos, servindo sempre como uma referência a ser seguida por mim. Aos meus queridos familiares que sempre incentivaram e se orgulharam do meu desenvolvimento acadêmico e à minha namorada Diane Schäfer-Surén, por todo carinho, amor e apoio incondicional ao longo da minha jornada acadêmica.

Agradeço aos membros e ex-membros da seção estudantil ASME PUC-Rio que visa o desenvolvimento acadêmico da ciência e da engenharia, e do time de futsal da Engenharia PUC-Rio por todo o conhecimento compartilhado e desenvolvido, as amizades cultivadas e as experiências proporcionadas ao longo dos nossos projetos e competições esportivas.

Aos grandes amigos que tive a oportunidade de conhecer na PUC-Rio, em especial Henrique Staib, Maurílio Donin e Matheus Blois, agradeço pelos momentos de companheirismo em que compartilhamos conhecimentos e risadas. Gostaria de agradecer a equipe de monitoria da PUC-Rio que me proporcionou participar do desenvolvimento de jovens futuros engenheiros. Meus colegas da MSHS (*Motor Services Hugo Stamp, Inc.*) e Eneva S.A. que acreditaram no meu potencial e tornaram minhas experiências de estágio não só um desenvolvimento profissional como também pessoal.

Agradeço à PUC-Rio e aos professores do Departamento de Engenharia Mecânica pelos conhecimentos adquiridos ao longo da minha graduação, aos projetos desenvolvidos e aos crescimento pessoal proporcionado. Agradeço ao pesquisador do IMES/PUC-Rio (*Instituto de Mobilidade e Energias Sustentáveis da PUC-Rio*), Epifanio M. Ticona pelo tempo e atenção dedicado no desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço por fim, de forma especial, ao meu orientador Professor Florian Pradelle por todo o ensinamento, compreensão, paciência,

disponibilidade e apoio ao longo do desenvolvimento deste projeto. Sua dedicação foi de extrema importância para a finalização deste trabalho.

Dedico este trabalho à minha família que esteve presente vibrando por todas minhas conquistas e, além dos meus melhores amigos, são minhas fontes de amor diárias.

## Resumo

### **Estudo experimental do impacto da substituição de óleo diesel por hidrogênio no perfil de emissão em um veículo pesado**

O Brasil está em sintonia com o esforço global para combater o agravamento do aquecimento global devido às emissões de gases de efeito estufa causadas pela atividade humana. Em 2021, quase metade das emissões relacionadas ao uso de energia no Brasil provieram da queima de combustíveis fósseis no setor de transporte, com destaque para o diesel. Nesse contexto, este estudo buscou examinar experimentalmente a substituição parcial do diesel comercial pelo hidrogênio em um motor de combustão interna de ignição por compressão. O objetivo foi avaliar como essa substituição afetaria o desempenho do motor e, consequentemente, as emissões produzidas por um veículo pesado. Para realizar esse estudo, foi realizado um levantamento de pesquisas anteriores que investigaram os efeitos da adição de hidrogênio em motores de ignição por compressão. Com base nesses estudos, foi possível gerar um benchmark e estabelecer as condições de teste. A fim de estimar o potencial de redução das emissões, foram definidos cenários nos quais o hidrogênio substituiria em até 30% da energia usada em veículos com tecnologia bicomcombustível. Além disso, um estudo teórico que simula a combustão considerando a Energia Livre de Gibbs foi feito como suplemento aos dados experimentais. O aumento do HES e da razão ar/combustível não geraram impacto nas emissões de  $H_2$ . Já as emissões de  $CO$  e  $CO_2$  tenderam a 0 ppm e decresceram 5% quando se aumentou o HES e a razão ar/combustível, respectivamente. Por fim, as emissões de  $H_2O$  e  $NO$  cresceram 8.33% e diminuíram com o aumento da razão ar/combustível e do HES, respectivamente.

### **Palavras-chave:**

Descarbonização; hidrogênio sustentável; diesel; motores bicomcombustíveis; emissões

## **Abstract**

### **Experimental Study on the Impact of Substituting Diesel Oil with Hydrogen on the Emission Profile in a Heavy-Duty Vehicle**

Brazil is aligned with the global effort to combat the worsening of global warming due to anthropogenic emissions of greenhouse gases. In 2021, nearly half of the emissions associated with energy usage in Brazil was originated from the burning of fossil fuels in the transportation sector, with diesel being the primary focus. In this context, this study aimed to experimentally investigate the partial replacement of conventional diesel with hydrogen in a compression ignition internal combustion engine. The objective was to assess how this substitution would impact the engine's performance and, consequently, the emissions produced by a heavy-duty vehicle. To conduct this study, the findings of previous research into the effects of hydrogen addition in compression ignition engines were taken into account. Based on these studies, it was possible to select the vehicle to be used in the tests and establish the testing conditions. In order to estimate the potential emissions reduction, scenarios were defined in which hydrogen would replace up to 30% of the energy used in vehicles with dual-fuel technology. Furthermore, a theoretical study that simulates combustion considering Gibbs Free Energy was carried out as a supplement to the experimental data. The increase in HES and air/fuel ratio had no impact on  $H_2$  emissions.  $CO$  e  $CO_2$  emissions tended to 0 ppm and decreased by 5% when the HES and the air/fuel ratio increased, respectively. Finally,  $H_2O$  and  $NO$  emissions increased by 8.33% and decreased with increasing air/fuel ratio and HES, respectively.

#### **Key-words:**

Decarbonization; sustainable hydrogen; diesel; dual-fuel engines; emissions

## Sumário

1.	INTRODUÇÃO .....	13
1.1.	CONTEXTUALIZAÇÃO .....	13
1.2.	AS ROTAS DE PRODUÇÃO DE HIDROGÊNIO .....	15
1.3.	USO PARA MOBILIDADE EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNADE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO .....	16
1.4.	OBJETIVO GERAL.....	17
1.5.	ORGANIZAÇÃO DO MANUSCRITO .....	18
2.	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	20
2.1.	EFEITOS DA ADIÇÃO DE HIDROGÊNIO NO DESEMPENHO DE MOTORES DE IGNIÇÃO POR COMPRESSÃO <i>CI</i> .....	23
2.1.1.	EFICIÊNCIA TÉRMICA DO MOTOR <i>BTE</i> .....	23
2.1.2.	CONSUMO ESPECÍFICO DE COMBUSTÍVEL OU <i>BSFC</i> .....	25
2.1.3.	CONSUMO ESPECÍFICO DE ENERGIA DO MOTOR OU <i>BSEC</i> .....	27
2.1.4.	FRAÇÃO DE SUBSTITUIÇÃO EM ENERGIA DE HIDROGÊNIO - HYDROGEN ENERGY SHARE - <i>HES</i> .....	28
2.1.5.	CARACTERÍSTICAS DA COMBUSTÃO .....	30
2.1.5.1.	ATRASO DA IGNIÇÃO .....	30
2.1.5.2.	TAXA DE LIBERAÇÃO DE CALOR ( <i>HRR</i> ).....	31
2.1.6.	MÉTODOS DE ADIÇÃO/INJEÇÃO DO HIDROGÊNIO EM MOTORES <i>CI</i> .....	32
2.2.	EFEITO DA ADIÇÃO DE HIDROGÊNIO NAS EMISSÕES DE MOTORES <i>CI</i> .....	34
2.2.1.	MONÓXIDO DE CARBONO <i>CO</i> .....	34
2.2.2.	DIÓXIDO DE CARBONO <i>CO2</i> .....	37
2.2.3.	ÓXIDOS DE NITROGÊNIO <i>NOx</i> .....	39
2.2.4.	HIDROCARBONETOS NÃO QUEIMADOS <i>HC</i> .....	42
2.2.5.	FULIGEM, FUMAÇA E MATERIAL PARTICULADO.....	44
2.2.6.	CONCLUSÕES PARCIAIS .....	46
3.	MODELAGEM MATEMÁTICA.....	48
4.	METODOLOGIA EXPERIMENTAL .....	52
4.1.	MATERIAL .....	52
4.1.1.	DEFINIÇÃO DO VEÍCULO PARA OS ENSAIOS.....	52
4.1.2.	COMBUSTÍVEIS.....	54
4.1.3.	SISTEMA DE FORNECIMENTO DE HIDROGÊNIO.....	54

4.1.4. MEDIÇÃO DA VAZÃO DE COMBUSTÍVEL DIESEL .....	57
4.2. MÉTODOS.....	57
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	60
5.1. VALIDAÇÃO DO CÓDIGO.....	60
5.2. RESULTADOS TEÓRICOS .....	61
5.2.1. PERFIL DA COMBUSTÃO EM RELAÇÃO A <b>CO<sub>2</sub></b> , <b>O<sub>2</sub></b> , <b>H<sub>2</sub>O</b> e <b>N<sub>2</sub></b> .	61
5.2.2. EMISSÕES DE HIDROGÊNIO <b>H<sub>2</sub></b> .....	63
5.2.3. EMISSÕES DE MONÓXIDO DE CARBONO <b>CO</b> .....	64
5.2.4. EMISSÕES DE DIÓXIDO DE CARBONO <b>CO<sub>2</sub></b> .....	65
5.2.5. EMISSÕES DE ÁGUA <b>H<sub>2</sub>O</b> .....	66
5.2.6. EMISSÕES DE MONÓXIDO DE NITROGÊNIO <b>NO</b> .....	67
5.3. RESULTADOS EXPERIMENTAIS .....	67
5.3.1. EMISSÕES DE MONÓXIDO DE CARBONO <b>CO</b> .....	68
5.3.2. EMISSÕES DE MONÓXIDO DE CARBONO <b>CO<sub>2</sub></b> .....	68
5.3.3. EMISSÕES DE MONÓXIDO DE CARBONO <b>O<sub>2</sub></b> .....	69
5.3.4. EMISSÕES DE MONÓXIDO DE CARBONO <b>NO<sub>x</sub></b> .....	69
5.3.5. EMISSÕES DE MONÓXIDO DE CARBONO <b>CH<sub>4</sub></b> .....	70
6. CONCLUSÕES .....	71
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	72
8. ANEXOS .....	76
8.1. TABELA DOS EFEITOS DA INJEÇÃO DE HIDROGÊNIO – PERFORMANCE DO MOTOR .....	76
8.2. TABELA DOS EFEITOS DA INJEÇÃO DE HIDROGÊNIO – EMISSÕES .....	86
8.3. CÓDIGO PARA O CÁLCULO DA SIMULAÇÃO DOS PRODUTOS DA COMBUSTÃO INCOMPLETA DO DIESEL B12 COM INJEÇÕES PARCIAIS (HES = 0%, 5%, 15% E 30%) DE HIDROGÊNIO ( <b>H<sub>2</sub></b> ) .....	101

## Lista de Tabelas

Tabela 3.1 - Conversão dos coeficientes $a_i, b_i, c_i, d_i$ em kJ/kg.K encontrados na referência [44] para os coeficientes A, B, C e D que foram implementados no código de MATLAB em J/mol.kg.....	50
Tabela 3.2 - Cálculo da percentagem mássica a partir da taxa de substituição volumétrica (diesel e biodiesel) e energética ( $H_2$ no disesel-biodiesel) .....	51
Tabela 4.1.1.1 - Especificações do motor CI à combustível Diesel [46]...	52
Tabela 4.2.1 - Parâmetros nominais em plena carga do motor MB OM 924 LA do veículo Accelo 815.....	58
Tabela 8.1.1 - Efeitos da injeção de hidrogênio - Performance do motor.	76
Tabela 8.2.1 - Efeitos da injeção de hidrogênio - Emissões.....	86



## Lista de Figuras

Figura 1.1.1 - Emissões de gases de efeito estufa do Brasil de 1990 a 2021 ( $GtCO_2e$ ). Fonte: adaptado de [1].....	13
Figura 1.2.1 - Uso de hidrogênio por setor e por região historicamente e no Net Zero Emissions (NZE) no cenário de 2050, 2020-2030. Fonte: adaptado de [2] .....	15
Figura 1.3.1 - Distribuição proporcional das emissões de $CO_2e$ nos setores de Energia e Processos Industriais (PIUP) em 2021 de acordo com subsetores, combustíveis/produtos e atividades. Fonte: adaptado de [1] .....	16
Figura 1.3.2 - Faixas de inflamabilidade e energia de ignição de combustíveis comuns. Fonte: adaptado de [38].....	17
Figura 2.1 - Trabalhos publicados por ano .....	21
Figura 2.2 - Distribuição dos trabalhos por países na literatura analisada .....	21
Figura 2.3 - Distribuição das faixas de potência dos motores CI na literatura analisada.....	21
Figura 2.1.1.1 - Eficiência térmica (BTE %) em função da carga (Engine Load %) de operação do motor e da porcentagem volumétrica de hidrogênio no ar de admissão [21] .....	25
Figura 2.1.2.1 - Variação do BSFC em função da rotação do motor e das misturas de combustíveis [22].....	27
Figura 2.1.4.1 - Razão das vazões mássicas de hidrogênio e combustível diesel vs fração de substituição energética HES. ....	29
Figura 2.1.4.2 - Taxas de substituição máxima de hidrogênio em fração de energia percentual vs potência do motor CI.....	29
Figura 2.1.4.3 - aixas de substituição de hidrogênio em fração de energia percentual vs ocorrências .....	30
Figura 2.1.5.1.1 - Atraso de ignição (Ignition delay) em função da carga e do período de tempo de injeção de diesel [18].....	31
Figura 2.1.5.2.1 - Efeito da carga de operação e adição de hidrogênio na taxa de liberação de calor [20] .....	32
Figura 2.2.1.1 - Variação das emissões de monóxido de carbono em função da carga [19] .....	35
Figura 2.2.2.1 - Formação de dióxido de carbono em função da carga e do período de injeção de diesel [18] .....	37
Figura 2.2.3.1 - Variação da concentração de $NO_x$ em função da rotação do motor e da mistura de combustível [22] .....	42
Figura 2.2.4.1 - Variação da emissão de hidrocarbonetos em função da carga de operação do motor e da porcentagem volumétrica de hidrogênio no ar de admissão [21] .....	44
Figura 2.2.5.1 - Variação da emissão de fumaça em função da carga e da mistura de combustível [19] .....	45
Figura 2.2.5.2 - Variação da emissão de material particulado em função da carga de operação do motor e das misturas de combustíveis [20] .....	46
Figura 4.1.1.1 - Esquema experimental .....	53
Figura 4.1.1.2 - Imagens do veículo Mercedes-Benz Accelo 815 já instrumentado, que foi avaliado no dinamômetro de chassis.....	53

Figura 4.1.3.1 - Componentes do sistema de fornecimento de hidrogênio. Adaptado de [35].	54
Figura 4.1.3.2 - Skid do sistema de fornecimento de hidrogênio.	54
Figura 4.2.1 - Janela de operação do motor MB OM 924 LA	58
Figura 5.1.1 - À esquerda o resultado do efeito da temperatura e umidade na produção de $H_2$ , $CO$ , $CO_2$ , $CH_4$ , $H_2O$ pela Reforma Auto Termal do Etanol [43] e à direita o resultado do efeito da temperatura e umidade na produção $H_2$ , $CO$ , $CO_2$ , $CH_4$ , $H_2O$ pela combustão incompleta do Etanol.	60
Figura 5.2.1.1 - Perfil da combustão completa das frações molares das misturas B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12+HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d) em função da razão ar/combustível	61
Figura 5.2.2.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de $H_2$ pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)	63
Figura 5.2.3.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de $CO$ pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)	64
Figura 5.2.4.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de $CO_2$ pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)	65
Figura 5.2.5.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de $H_2O$ pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)	66
Figura 5.2.6.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de $NO$ pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)	67
Figura 5.3.1.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de $CO$ provenientes de combustão de Diesel B12	68
Figura 5.3.2.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de $CO_2$ provenientes de combustão de Diesel B12	68
Figura 5.3.3.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de $O_2$ provenientes de combustão de Diesel B12	69
Figura 5.3.4.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de $NO_x$ provenientes de combustão de Diesel B12	69
Figura 5.3.5.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de $CH_4$ provenientes de combustão de Diesel B12	70

## Lista de abreviaturas

ATDC	<i>After top dead center (Depois do centro morto superior)</i>
BMEP	<i>Brake mean effective pressure (Pressão efetiva media do freio)</i>
BP	<i>Break power (Potência de quebra)</i>
BSEC	<i>Brake specific energy consumption (Consumo de energia específico do freio)</i>
BSFC	<i>Brake specific fuel consumption (Consumo de combustível específico do freio)</i>
BTDC	<i>Before Top dead center (Antes do centro morto superior)</i>
BTE	<i>Brake thermal efficiency (Eficiência térmica do freio)</i>
CA	<i>Crank angle (Ângulo da manivela)</i>
CO	<i>Carbon monoxide (Monóxido de carbono)</i>
CO <sub>2e</sub>	<i>Equivalent carbon dioxide (Dióxido de carbono equivalente)</i>
CO <sub>2</sub>	<i>Carbon dioxide (Dióxido de carbono)</i>
CH <sub>4</sub>	<i>Methane (Metano)</i>
C <sub>4</sub> H <sub>6</sub>	<i>Ethane (Etano)</i>
CI	<i>Compression ignition (Ignição por compressão)</i>
CR	<i>Compression ratio (Razão de compressão)</i>
DI	<i>Direct injection (Injeção direta)</i>
ECU	<i>Electronic-controlled unit (Unidade de controle eletrônica)</i>
EGR	<i>Exhaust gas recirculation (Recirculação dos gases de escape)</i>
EGT	<i>Exhaust gas temperature (Temperatura dos gases de escape)</i>
H <sub>2</sub>	<i>Hydrogen gas (Gás hidrogênio)</i>
HC	<i>Hydrocarbon (Hidrocarboneto)</i>
HCCI	<i>Homogenous charge compression ignition (Ignição por compressão de carga homogênea)</i>
HES	<i>Hydrogen Energy Share (Energy Fraction) (Fração de Energia de Hidrogênio)</i>
H <sub>2</sub> O	<i>Water / steam (Água / vapor)</i>
HRR	<i>Heat release rate (Taxa de liberação de calor)</i>
ICE	<i>Internal combustion engine (Motor de combustão interna)</i>
ISFC	<i>Indicated specific fuel consumption (Consumo específico de combustível indicado)</i>
ISCO/ISHC/ISNO <sub>x</sub>	<i>Indicated specific CO/HC/ISNO<sub>x</sub> (Indicado CO/HC/ ISNO<sub>x</sub> específico)</i>
IMEP	<i>Indicated mean effective pressure (Pressão efetiva média indicada)</i>
ITE	<i>Indicated thermal efficiency (Eficiência térmica indicada)</i>

IVO	<i>Intake valve opening (Abertura da válvula de admissão)</i>
LHV	<i>Lower heating value (Poder calorífico inferior)</i>
LPG	<i>Liquified petroleum gas (Gás liquefeito de petróleo)</i>
LPL	<i>Low pressure loop (Malha de baixa pressão)</i>
MBT	<i>Maximum brake torque (Torque máximo de freio)</i>
$n$	<i>Rotational speed (Velocidade rotacional)</i>
$NO_x$	<i>Nitrogen oxide (Óxido de nitrogênio)</i>
$O_2$	<i>Oxygen gas (Gás oxigênio)</i>
SFC	<i>Specific fuel consumption (Consumo específico de combustível)</i>
SI	<i>Spark ignition (Ignição por centelha)</i>
SPG	<i>Spark plug cap (Tampa da vela de ignição)</i>
TDC	<i>Top dead center (Centro morto superior)</i>
THC	<i>Total hydrocarbon (Hidrocarbonetos totais)</i>
TMI	<i>Timed manifold injection technique (Técnica de injeção cronometrada de coletor)</i>
TPI	<i>Timed port injection technique (Técnica de injeção de porta temporizada)</i>
T	<i>Torque</i>

# 1. INTRODUÇÃO

## 1.1. Contextualização

As emissões brutas de gases de efeito estufa do Brasil foram de 2,4 bilhões de toneladas de dióxido de carbono equivalente ( $GtCO_2e$ , GWP-AR5) em 2021. O crescimento foi de 12,2% em relação ao ano anterior, quando o país emitiu 2,1 bilhões de toneladas de  $CO_2e$ . Com a retomada das atividades após o período de crise sanitária, trata-se do maior aumento de emissões em quase duas décadas, superado apenas pelos 20% de elevação registrados em 2003, quando o país atingiu seu recorde absoluto de poluição climática, com 3 bilhões de toneladas brutas de  $CO_2e$  [1]. Simultaneamente, as emissões globais cresceram cerca de 5%.

Portanto, a aceleração verificada no Brasil é mais do que duas vezes maior do que a média mundial. Isso se deve à forte alta do desmatamento no país, sobretudo na Amazônia. Em 2021, as emissões por mudança de uso da terra e florestas (MUT), setor que compreende principalmente o desmatamento, tiveram alta de 18,5%. Como demonstrado pela Figura 1.1.1, o setor de energia teve a maior alta em suas emissões desde 1973, um dos anos do “milagre” econômico da ditadura: 12,2%. Nesse setor, em 2021, foram emitidas 435 milhões de toneladas, contra 387 milhões em 2020.

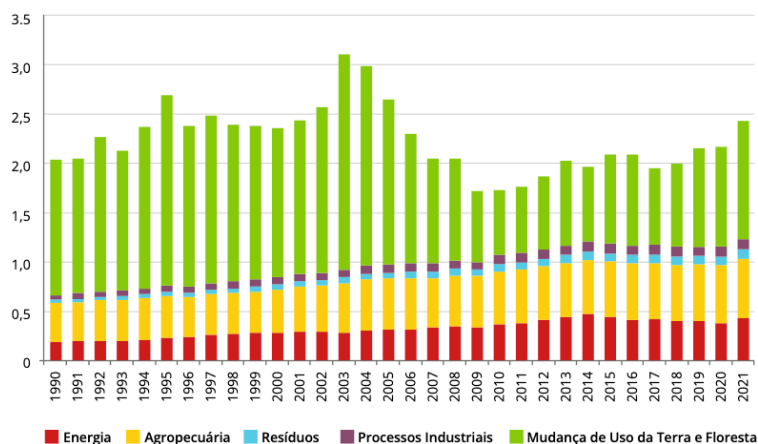


Figura 1.1.1 - Emissões de gases de efeito estufa do Brasil de 1990 a 2021 ( $GtCO_2e$ ).  
Fonte: adaptado de [1]

O panorama global de energia está passando por uma mudança notável à medida que o mundo se esforça para combater as mudanças climáticas e aprimorar a segurança energética, fazendo a transição para

fontes de energia mais limpas e sustentáveis. Nesse contexto, o hidrogênio de baixas emissões emergiu como uma ferramenta importante para descarbonizar setores nos quais as emissões são difíceis de reduzir. A recente crise global de energia também deu mais ímpeto ao hidrogênio de baixas emissões como meio de fortalecer a segurança energética. Como resultado, os governos reforçaram seus compromissos de atingir emissões líquidas zero, e o hidrogênio de baixas emissões tornou-se parte integrante de seus planos. Além disso, algumas das principais economias adotaram recentemente novas estratégias industriais, com as tecnologias de hidrogênio como elemento-chave. No entanto, apesar desse impulso, ainda existem desafios significativos que precisam ser enfrentados para desbloquear o potencial do hidrogênio de baixas emissões [2].

Primeiramente, no que diz respeito ao uso e produção de hidrogênio, pode-se dizer que o uso global de hidrogênio está aumentando, mas a demanda ainda está concentrada em usos tradicionais no refino e na indústria química, e a maioria da produção ainda se baseia em combustíveis fósseis não reduzidos. A produção de hidrogênio de baixas emissões ainda não decolou como uma indústria convencional [2].

No que diz respeito ao seu comércio e infraestrutura, há alguns destaques. O número de projetos anunciados continua crescendo, e o comércio de hidrogênio está ganhando impulso. No entanto, o progresso ainda está atrasado em algumas áreas, principalmente na infraestrutura de hidrogênio e inovação tecnológica. Junto a isso, no que tange aos investimentos e inovações, pode-se dizer que com as interrupções das cadeias de suprimentos, a inflação colocou algumas iniciativas em riscos.

Por fim, destaca-se o crescimento do número de políticas e estratégias anunciadas para apoiar a ampliação do hidrogênio de baixas emissões. Além de haver novas regulamentações relacionadas aos atributos ambientais do hidrogênio e a necessidade de cooperação internacional para garantir que os certificados sejam mutuamente reconhecidos e evitar uma possível fragmentação do mercado.

## 1.2. As rotas de produção de hidrogênio

A produção global de hidrogênio atingiu quase 95 Mt em 2022, um aumento de 3% em comparação com 2021. Assim como em 2021, a produção foi dominada pelo uso de combustíveis fósseis. O gás natural sem captura, utilização e armazenamento de carbono (CCUS) representou 62% da produção global, enquanto o carvão, principalmente localizado na China, foi responsável por 21% da produção global. O hidrogênio como subproduto, produzido em refinarias e na indústria petroquímica durante a reforma do nafta e frequentemente utilizado em outros processos de refino e conversão (por exemplo, hidrocrackeamento, dessulfurização), representou 16% da produção global. A produção de hidrogênio de baixas emissões em 2022 foi inferior a 1 Mt (0,7% da produção global), semelhante a 2021 e quase inteiramente proveniente de combustíveis fósseis com CCUS. A produção por meio da eletrólise da água continuou sendo relativamente pequena, ainda abaixo de 100 kt de  $H_2$  em 2022, o que representa um crescimento de 35% em comparação com o ano anterior [2].

A Figura 1.2.1 ilustra que o uso hidrogênio continua a crescer mas segue concentrado em aplicações tradicionais, como indústria e refino.

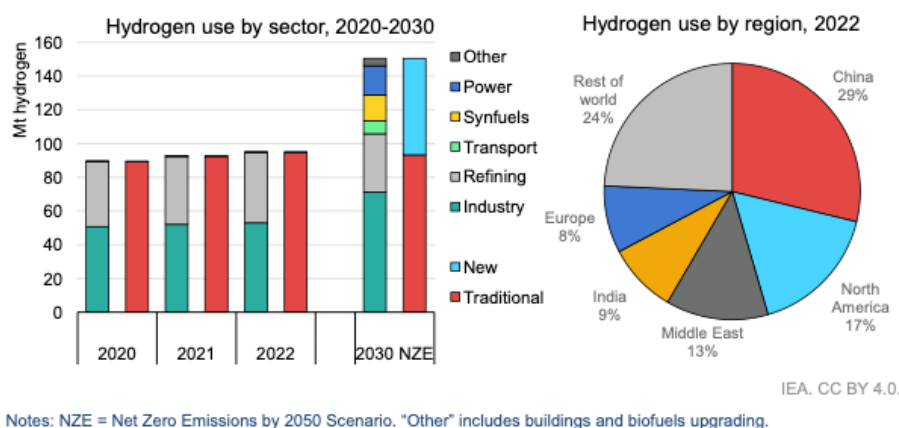


Figura 1.2.1 - Uso de hidrogênio por setor e por região historicamente e no Net Zero Emissions (NZE) no cenário de 2050, 2020-2030. Fonte: adaptado de [2]

Em nível regional, a China respondeu por quase 30% da produção global, refletindo as grandes demandas domésticas para refinarias e a indústria química. Mais de 70% da produção global ocorreram na China, nos Estados Unidos, no Oriente Médio, na Índia e na Rússia em 2022 (em ordem decrescente de participação na produção).

No Brasil, tanto o hidrogênio verde (proveniente da eletrólise da água com energia de fontes renováveis, seja eólica ou solar) quanto o hidrogênio azul (proveniente da reforma a vapor do gás natural e, eventualmente, a partir de outros combustíveis fósseis com CCUS) podem ser explorados. O hidrogênio verde tem forte vantagem competitiva no Brasil, devido a matriz elétrica do país, que é majoritariamente limpa, e ao potencial ainda não explorado das fontes solares e eólicas onshore e offshore. [3]

### 1.3. Uso para mobilidade em motores de combustão internade ignição por compressão

O subsetor de transporte, que é o maior contribuidor em emissões no setor de energia (Figura 1.3.1), em quase sua totalidade opera por meio de motores de combustão interna (IC) que queimam combustíveis para gerar energia. Atualmente, a gasolina e o diesel são amplamente utilizados como combustíveis líquidos fósseis. Para mitigar os efeitos das emissões de Gases do Efeito Estufa (GEE), é essencial promover o uso de combustíveis descarbonizados ou com maior eficiência de combustão para alimentar os motores IC. Entre as alternativas disponíveis, o hidrogênio é reconhecido como um vetor de energia limpa e renovável, sendo considerado um complemento ideal aos combustíveis tradicionais devido ao seu elevado poder calorífico.

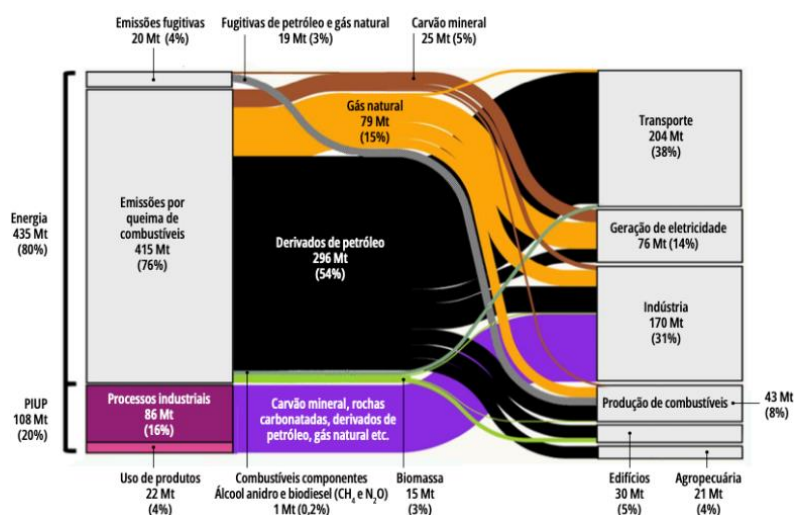


Figura 1.3.1 - Distribuição proporcional das emissões de  $CO_2e$  nos setores de Energia e Processos Industriais (PIUP) em 2021 de acordo com subsectores, combustíveis/produtos e atividades. Fonte: adaptado de [1]

O hidrogênio é um gás inflamável com uma ampla faixa de inflamabilidade (4% a 75% em volume) e energia de ignição relativamente



reduzida (0,02 mJ) [36]. A Figura 1.3.2, mostra as faixas de inflamabilidade e energia de ignição de combustíveis utilizados comumente. O hidrogênio tem uma massa específica muito reduzida e, portanto, deve ser armazenado em elevadas pressões (faixa de 10.000 à 15.000 psi) para atingir massa suficiente para uso prático. A facilidade de ignição e a alta pressão de armazenamento do hidrogênio criam uma grande parte do risco associado ao uso do hidrogênio [37].

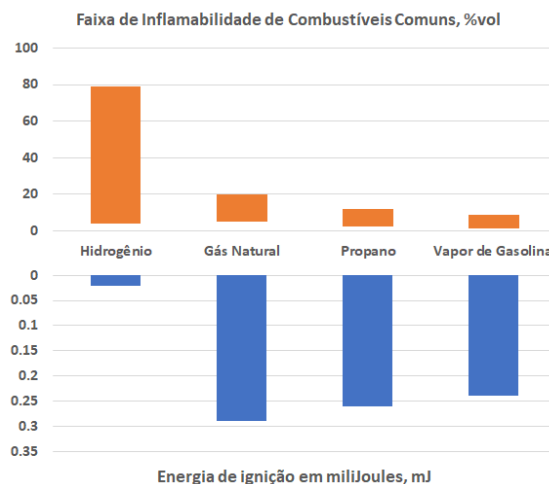


Figura 1.3.2 - Faixas de inflamabilidade e energia de ignição de combustíveis comuns. Fonte: adaptado de [38]

Com uma temperatura de autoignição mais elevada do que a gasolina, o álcool e o diesel, o hidrogênio possibilita maiores taxas de compressão, resultando em uma melhoria na eficiência térmica do ponto de vista termodinâmico. Em comparação com os sistemas de conversão de energia baseados em células a combustível, os motores de combustão interna (ICE) apresentam a vantagem de uma maior tolerância às impurezas dos combustíveis e maior flexibilidade na aplicação de misturas de combustíveis. Além disso, há uma redução no uso de materiais raros e, principalmente, uma transição mais direta dos veículos convencionais, aproveitando as tecnologias já existentes dos ICE com custos reduzidos e processos de fabricação maduros.

#### 1.4. Objetivo geral

Este estudo tem como objetivo principal realizar uma análise da substituição parcial do diesel comercial pelo hidrogênio em um motor de combustão interna de ignição por compressão e avaliar o impacto no perfil de emissões de Veículo Urbano de Carga (VUC). Os resultados obtidos

contribuirão para o avanço do conhecimento no campo da utilização de hidrogênio como combustível complementar, fornecendo insights importantes para futuros desenvolvimentos tecnológicos e políticas relacionadas à transição energética na indústria de transporte rodoviário.

Além do objetivo principal, há também os objetivos secundários a seguir:

- Validar o modelo de simulação de gases de combustão que considera a Minimização da Energia Livre de Gibbs por meio da comparação com os dados obtidos experimentalmente e aqueles encontrados na literatura;
- Avaliar o limite máximo de injeção de hidrogênio de modo a não haver a pré-ignição;
- Avaliar o aumento da eficiência energética com o uso do hidrogênio diretamente em um veículo com motor de ignição por compressão;
- Deslocar a demanda por diesel rumo à descarbonização não apenas com a substituição do diesel pelo hidrogênio, mas potencializando a combustão.

### **1.5. Organização do Manuscrito**

No Capítulo 2 deste trabalho, é apresentada uma revisão da literatura que se desenvolveu por meio de um estudo sistemático da literatura técnica desta área de conhecimento. A metodologia foi realizada utilizando técnicas de análise bibliométrica, a qual, é utilizada para explorar e analisar rigorosamente grandes volumes de dados de informação científica.

O capítulo 3 dedica-se a modelagem matemática que simulará a combustão das misturas avaliadas no presente estudo por meio da Minimização da Energia Livre de Gibbs que avaliará as emissões provenientes dessa combustão.

O Capítulo 4 dedica-se a metodologia que definirá o veículo a ser utilizado nos testes assim como as condições de operação dele, os insumos para a realização dos testes, o combustível comercial, a

instrumentação do veículo e as modificações feitas, assim como o planejamento experimental.

No Capítulo 5, são apresentados os dados adquiridos ao longo da execução das simulações e dos testes após serem processados.

Por fim, no Capítulo 6, são apresentadas as conclusões fundamentais decorrentes deste estudo, enfatizando as principais contribuições alcançadas e os insights obtidos. Além disso, algumas sugestões valiosas para trabalhos futuros são delineadas, visando a expansão e o aprimoramento das investigações sobre impacto da substituição de óleo diesel por hidrogênio no perfil de emissão em um veículo pesado.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Os resultados apresentados na pesquisa bibliométrica mostram um panorama geral dos estudos sobre os efeitos da adição de hidrogênio em motores de combustão por compressão CI. Posteriormente, foram realizados refinamentos na pesquisa bibliométrica utilizando filtros para encontrar revisões da literatura sobre esta área de pesquisa. Foram encontradas e analisadas as publicações de três revisões relevantes que discutem sobre os efeitos da adição de hidrogênio ao combustível Diesel convencional [9– 11]. Visando a utilização de óleo diesel S10 para uso rodoviário no Brasil, no qual há a adição obrigatória de biodiesel (ésteres metílicos de ácidos graxos), foi incluído o trabalho de Thiyagarajan et al. [12], que abordou a revisão do efeito da injeção de hidrogênio em motores CI alimentados com combustível diesel/biodiesel de origem vegetal, considerando de maneira abrangente e complementar todos os impactos estudados. Adicionalmente, foi considerado o trabalho de Wang et al. [13] o qual é uma revisão geral dos efeitos da adição de hidrogênio em motores de ignição por compressão e centelha. Com os trabalhos citados acima, foram analisadas 45 publicações apresentadas nas revisões da literatura.

Além da amplitude do escopo, todos os trabalhos selecionados para compor a análise quantitativa foram escolhidos pela qualidade da descrição das informações. Para isso, usamos como um dos critérios de seleção o impacto da publicação medida na análise bibliométrica, na qual, por meio do acesso à base de dados *Web of Science*, utilizaram-se as palavras chave “performance”, “combustion”, “blends”, “compression ignition engine”, “exhaust emissions” e “hydrogen”. Na análise dos trabalhos selecionados para esta revisão bibliográfica, a Figura 2.1 mostra a distribuição temporal do número de publicações desta área de pesquisa e mostra o interesse relativamente recente da comunidade científica. Já a Figura 2.2 apresenta a distribuição dos trabalhos publicados por países, na qual Turquia, Índia, Reino Unido, Romênia e Japão destacam-se no número de publicações sobre o tema. E, por fim, na Figura 2.3 há predominância de estudos de unidades de reduzida potência mas não na

faixa de maiores potências na amostra resultante da revisão da literatura, o que caracteriza a originalidade do estudo proposto.

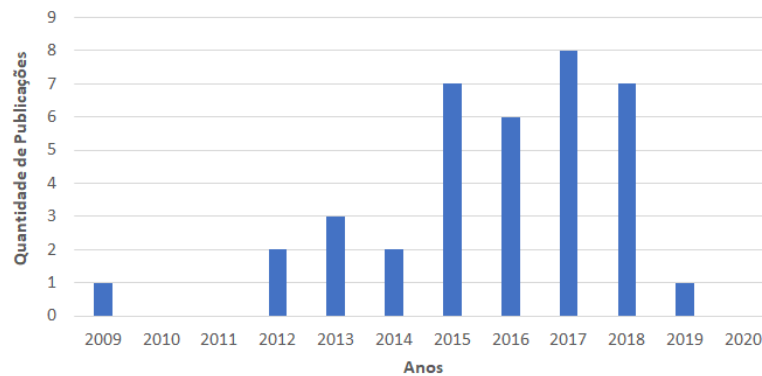


Figura 2.1 - Trabalhos publicados por ano

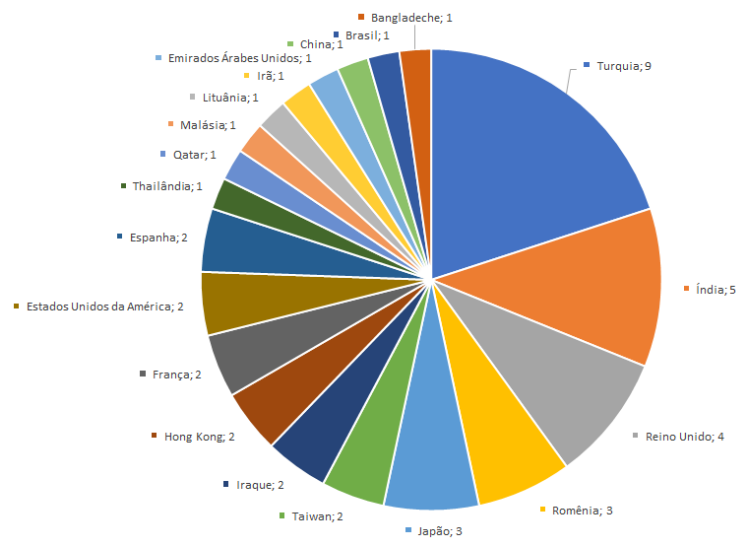


Figura 2.2 - Distribuição dos trabalhos por países na literatura analisada

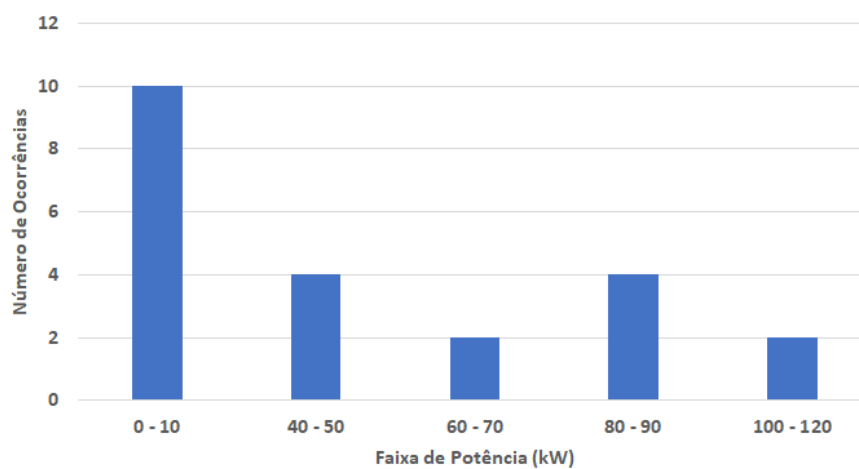


Figura 2.3 - Distribuição das faixas de potência dos motores CI na literatura analisada

Os parâmetros que permitem avaliar o desempenho energético do motor e determinar os efeitos da adição de hidrogênio, são obtidos realizando ensaios em bancada dinamométrica e existem normas específicas que fornecem a metodologia a ser utilizada. No método de avaliação de desempenho, são obtidas em particular, a apresentação das curvas de potência e de consumo específico de combustível em cargas parciais e plena carga em função da velocidade rotação do motor. Os principais parâmetros de avaliação de desempenho apresentados na literatura são compilados na Tabela 8.1 do Anexo e listados a seguir:

- Eficiência térmica do motor *BTE*;
- Pressão média efetiva no motor *BMEP*;
- Consumo específico de combustível do motor *BSFC*;
- Consumo específico de energia do motor *BSEC*;
- Potência do motor *BP*;
- Torque do motor.

Além do desempenho, como já mencionado nos objetivos do projeto, é preciso verificar a redução efetiva das emissões nos gases de escapamento da máquina térmica. Para avaliar a variação dos parâmetros de desempenho, são necessárias a medição das vazões de óleo Diesel e hidrogênio e os dados fornecidos pelo dinamômetro, como torque, RPM e potência que o veículo entrega nas rodas. Na Tabela 8.2 do Anexo, foram compilados os resultados obtidos na literatura e mostra a variação da composição dos diferentes compostos indesejados com a adição de hidrogênio no modo de operação bicomcombustível. Entre os elementos da composição nos gases de escapamento, foram considerados:  $C$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $NO_x$ , hidrocarbonetos não queimados (*HC*), fuligem, fumaça, material particulado, emissões não regulamentadas e  $H_2$  não queimado.

Nas Tabelas 8.1 de desempenho e 8.2 de emissões, foram identificadas, em verde, as variações desejadas dos parâmetros, isto é, o aumento (eficiência) ou diminuição (emissões) positiva do indicador. Resultados adversos, que indicam variações não esperadas foram coloridas em vermelho. No caso de não haver informações N/A, as células foram coloridas em cinza.

## 2.1. Efeitos da adição de hidrogênio no desempenho de motores de ignição por compressão CI

Como já mencionado, para avaliar os efeitos da adição de hidrogênio no desempenho de motores, na literatura são utilizados vários parâmetros e as metodologias de quantificação serão detalhadas a seguir. Também, serão comentados os resultados encontrados na literatura sobre os desempenhos apresentados na Tabela 8.1.

### 2.1.1. Eficiência térmica do motor *BTE*

Para obter este parâmetro, primeiro é necessário determinar a potência térmica ou calor de combustão fornecida pelos combustíveis Diesel e hidrogênio mostrada na Equação 2-1.

$$\dot{Q}_{in} = \dot{m}_{Diesel} * LHV_{Diesel} + \dot{m}_{H_2} * LHV_{H_2} \quad (2-1)$$

A eficiência térmica do motor ou *Brake Thermal Efficiency BTE*, é avaliada pela razão da potência mecânica entregue no eixo do motor pelo calor de combustão do combustível [14].

$$BTE = \frac{\dot{W}_{out}}{\dot{Q}_{in}} = \frac{T * 2\pi n}{\dot{m}_{Diesel} * LHV_{Diesel} + \dot{m}_{H_2} * LHV_{H_2}} \quad (2-2)$$

Na literatura, o valor inverso do BTE é denominado consumo específico ou *Brake Specific Energy Consumption BSEC*. Este parâmetro permite avaliar a relação do consumo de energia e a potência do motor. Alternativamente, pode ser avaliado pelo produto do BSFC pelo poder calorífico do combustível *LHV* em MJ/kWh.

Como se pode observar na Tabela 8.1 de análise de desempenho de motores CI nos trabalhos analisados na literatura, em 15 publicações foi reportado que houve aumento deste parâmetro. Por outro lado, 14 trabalhos apresentaram resultados negativos, indicando a diminuição do parâmetro *BTE*. Em três trabalhos, observou-se que houve o incremento do parâmetro *BTE* em cargas parciais médias e elevadas e o contrário ocorre em cargas parciais reduzidas, em que o *BTE* diminui [15–17]. Dimitriou et al. [16] observaram que no caso de cargas parciais menores, o parâmetro *BTE* aumenta quando a fração de substituição em energia do hidrogênio é maior que 80%.

Talibi et al. [18] observaram que a eficiência térmica máxima foi de 42,5% com a carga de 67% da potência máxima do motor. Dentre as misturas de combustíveis, para cargas entre 0% a 39% e entre 55,5% a 67%, as maiores eficiências foram obtidas quando apenas diesel foi usado no motor, e, para a faixa entre 39% e 55,5% de carga, a eficiência térmica foi maior somente quando o motor operou com maiores níveis de *HES*.

Bose et al. [19] observaram que o motor se mostrou mais eficiente com a mistura *diesel* +  $H_2$  do que com o diesel puro. Com 20% de carga e diesel puro garantiu-se eficiência térmica de 11% enquanto o *diesel* +  $H_2$  apresentou eficiência de 12,5%. Já com 40% de carga, o diesel puro evidenciou eficiência de 19,5% enquanto o *diesel* +  $H_2$  teve eficiência de 22,5%. Já para 60% de carga, o diesel puro apresentou eficiência de 23% enquanto o *diesel* +  $H_2$  entregou 26% de eficiência. Por fim, para 80% de carga, o diesel puro apresentou 30,2% de eficiência enquanto o *diesel* +  $H_2$  desenvolveu 34,1% de eficiência térmica.

Zhou et al. [20] observaram que em 10% de carga, o diesel puro teve eficiência térmica de 19% enquanto as outras 4 misturas de *diesel* +  $H_2$  tiveram eficiências em torno de 16%. Ao elevar a carga para 30%, foi observado que as eficiências ficaram entre 29% com *diesel* +  $H_2$  (20%) e 33 % com o diesel puro. Com a elevação da carga para 50%, a eficiência ficou entre 34% com o *diesel* +  $H_2$  (10%) e 38% com o *diesel* +  $H_2$  (40%). Aos 70% de carga, a eficiência ficou entre 40% com o diesel puro e 45% com o *diesel* +  $H_2$  (30%). Por fim, na carga máxima testada de 90%, a eficiência ficou entre 39% com o diesel puro e *diesel* +  $H_2$  (10%) e 43% com o *diesel* +  $H_2$  (30%).

Jhang et al. [21] observaram que a adição de hidrogênio aumentou a eficiência térmica em todos os casos testados, conforme evidencia a Figura 2.4. Notou-se que as maiores eficiências são obtidas no caso onde 1,2% de hidrogênio é injetado por volume de ar na admissão.



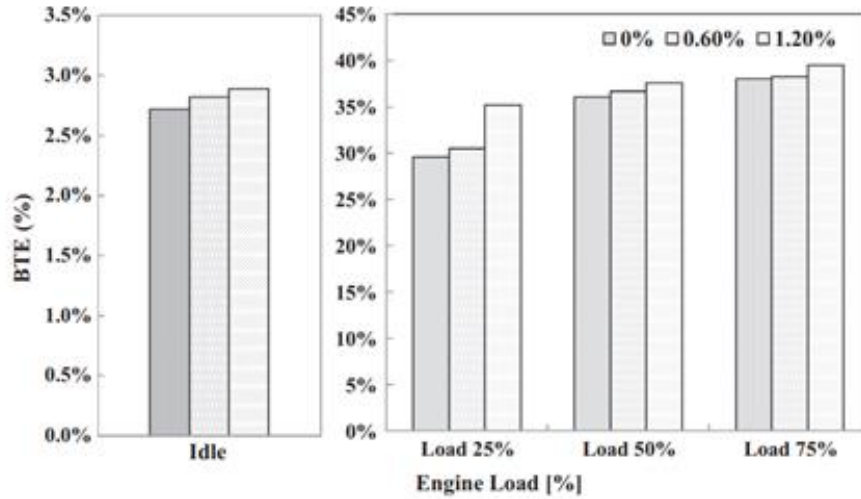


Figura 2.1.1.1 - Eficiência térmica (BTE %) em função da carga (Engine Load %) de operação do motor e da porcentagem volumétrica de hidrogênio no ar de admissão [21]

No geral, a presença do hidrogênio melhora a eficiência térmica devido à rápida velocidade da chama e ao alto poder calorífico inferior do gás, que resulta em uma combustão mais rápida e completa que causa uma melhoria geral na qualidade da combustão.

### 2.1.2. Consumo específico de combustível ou *BSFC*

Na mistura de combustíveis diesel-hidrogênio, pode ser calculada uma vazão equivalente de combustível diesel, a partir da Equação 2-1 e a relação  $\dot{Q} = \dot{m} * LHV$  da potência térmica dos combustíveis, mostrado na Equação 2-3.

$$\dot{m}_{Diesel}^{Equiv} = \frac{\dot{Q}_{in}}{LHV_{Diesel}} = \dot{m}_{Diesel} + \frac{LHV_{H_2}}{LHV_{Diesel}} \dot{m}_{H_2} \quad (2-3)$$

O consumo específico de combustível ou *Brake Specific Fuel Consumption BSFC*, é avaliado a partir da vazão equivalente de diesel  $\dot{m}_{Diesel}^{Equiv}$  e a potência que fornece o motor no eixo  $\dot{W}_{out}$ , apresentado na Equação 2-4.

$$BSFC = \frac{\dot{m}_{Diesel}^{Equiv}}{\dot{W}_{out}} = \frac{\dot{m}_{Diesel} + \frac{LHV_{H_2}}{LHV_{Diesel}} \dot{m}_{H_2}}{T * 2\pi n} \quad (2-4)$$

Na Tabela 8.1, foram encontrados 13 trabalhos indicando a redução deste parâmetro de avaliação de desempenho e apenas 3 trabalhos indicaram o aumento do consumo específico de combustível. Zhou et al.

[17], observaram a redução deste parâmetro em cargas elevadas do motor e o contrário ocorre com cargas médias e menores.

Bose et al. [19], após a realização dos testes, observaram que com 20% de carga, o *Brake Specific Fuel Consumption (BSFC)* do diesel puro foi de 0,81 kg/kWh enquanto do *diesel + H<sub>2</sub>* foi de 0,3 kg/kWh. Ao elevar a carga para 40%, o *BSFC* para o diesel puro foi de 0,25 kg/kWh enquanto o *BSFC* do *diesel + H<sub>2</sub>* foi de 0,17 kg/kWh. Ao elevar a carga ao patamar de 60%, foi observado que o *BSFC* do diesel foi de 0,27 kg/kWh enquanto o *BSFC* do *diesel + H<sub>2</sub>* foi de 0,19 kg/kWh. Por fim, ao elevar a carga para a máxima testada de 80%, o *BSFC* do diesel foi de 0,25 kg/kWh enquanto o *BSFC* do *diesel + H<sub>2</sub>* foi de 0,15 kg/kWh.

Zhou et al. [20], ao realizar os testes, observaram que o consumo de combustível e de suas misturas variou entre 0,67 g/s e 2,78 g/s para o diesel e entre 0 mg/s a 383,6 mg/s para o hidrogênio. Segundo o autor, o *BSFC* em 10% de carga foi de 460 g/kWh para o diesel puro enquanto as outras 4 misturas de *diesel + H<sub>2</sub>* tiveram *BSFC* variando entre de 530 a 510 g/kWh. Ao elevar a carga para 30%, foi observado que a diferença de *BSFC* entre o diesel puro e as misturas de *diesel + H<sub>2</sub>* diminuíram, de modo que os valores ficaram entre o *BSFC* de 255 g/kWh para o diesel puro e o *BSFC* de 290 g/kWh para o *diesel + H<sub>2</sub>* (20%). Com a elevação da carga para 50%, os resultados de *BSFC* ficaram entre 225 g/kWh para o *diesel + H<sub>2</sub>* (40%) e 260 g/kWh para o *diesel + H<sub>2</sub>* (10%). Aos 70% de carga, os resultados de *BSFC* ficaram entre 190 g/kWh para o *diesel + H<sub>2</sub>* (30%) e 220 g/kWh para o diesel puro. Por fim, na carga máxima testada de 90%, os resultados de *BSFC* ficaram entre 200 g/kWh para o *diesel + H<sub>2</sub>* (30%) e 223 g/kWh para o *diesel + H<sub>2</sub>* (10%).

Jhang et al. [21] apontaram que o *BSFC* de 280,7 g/kWh para o diesel puro foi reduzido em 3,67% e 5,88% quando houve 10% e 20% de fração energética de hidrogênio (*HES*) na mistura de combustão, respectivamente, com 25% de carga. Ao elevar a carga para 50%, o *BSFC* de 230,2 g/kWh para o diesel puro foi reduzido em 2,11% e 11,8% quando houve 10% e 20% de fração energética de hidrogênio (*HES*) na mistura da combustão, respectivamente. Por fim, aos 75% de carga, o *BSFC* de 228,3

g/kWh para o diesel puro foi reduzido em 5,53% e 12,8% quando houve 10% e 20% de fração energética de hidrogênio (*HES*) na mistura da combustão, respectivamente.

Serin e Yıldızhan [22] observaram que o *BSFC* do B20 puro foi maior do que o *BSFC* do B20 + 10 LPM de hidrogênio. De todo modo, é possível pontuar que para 1200 RPM o *BSFC* foi de 217,8 g/kWh com B20 puro e de 198,9 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1400 RPM, o *BSFC* foi de 184,9 g/kWh com B20 puro e de 168,2 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1600 RPM, o *BSFC* foi de 167,9 g/kWh com B20 puro e de 152,6 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1800 RPM, o *BSFC* foi de 163,1 g/kWh com B20 puro e de 148,4 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2000 RPM, o *BSFC* foi de 153 g/kWh com B20 puro e de 139,1 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2200 RPM, o *BSFC* foi de 158,8 g/kWh com B20 puro e de 144,3 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2400 RPM, o *BSFC* foi de 151,9 g/kWh com B20 puro e de 138,4 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2600 RPM, o *BSFC* foi de 175,4 g/kWh com B20 puro e de 160,2 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Por fim, com 2800 RPM, o *BSFC* foi de 213 g/kWh com B20 puro e de 193,5 g/kWh com B20 + 10 LPM de hidrogênio. A Figura 2.1.2.1 evidencia essa descrição.

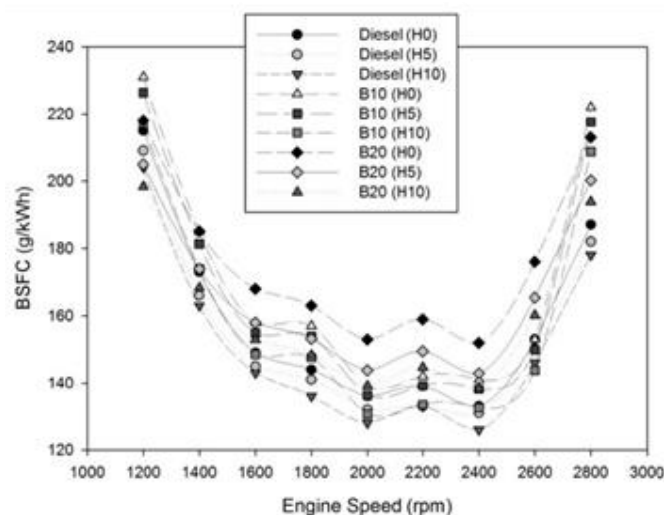


Figura 2.1.2.1 - Variação do BSFC em função da rotação do motor e das misturas de combustíveis [22]

### 2.1.3. Consumo específico de energia do motor ou *BSEC*

Na literatura, este parâmetro permite avaliar a relação do consumo de energia e a potência do motor, apresentado na Equação 2-5. Alternativamente, pode ser avaliado pelo produto do *BSFC* e o poder calorífico do combustível *LHV*, sendo apresentado nas unidades de [MJ/kWh].

$$BSEC = \frac{\dot{Q}_{in}}{\dot{W}_{out}} = \frac{\dot{m}_{Diesel} \cdot LHV_{Diesel} + \dot{m}_{H_2} \cdot LHV_{H_2}}{T \cdot 2\pi n} \quad (2-5)$$

Na Tabela 8.1, foram encontrados 7 trabalhos que relataram a redução deste parâmetro na operação bicomcombustível diesel-hidrogênio e 3 trabalhos indicam o contrário.

#### 2.1.4. Fração de substituição em energia de hidrogênio - Hydrogen Energy Share - *HES*

A potência térmica ou calor de combustão fornecida pelos combustíveis diesel e hidrogênio foi avaliada como mostra a Equação 2-6.

$$\dot{Q}_{in} = \dot{m}_{Diesel} \cdot LHV_{Diesel} + \dot{m}_{H_2} \cdot LHV_{H_2} \quad (2-6)$$

Em que, *LHV* é o poder calorífico inferior do combustível e apresentam os seguintes valores:  $LHV_{Diesel} = 43 \text{ MJ/kg}$  e  $LHV_{H_2} = 120 \text{ MJ/kg}$ .

Em várias publicações, a fração de substituição de hidrogênio em base energética é denominada como *Hydrogen Energy Share HES*, a qual fornece quantitativamente a contribuição energética do hidrogênio na operação bicomcombustível. Em termos de energia ou base energética, a fração de substituição do hidrogênio foi avaliada com a Equação 2-7.

$$HES = \frac{\dot{m}_{H_2} \cdot LHV_{H_2}}{\dot{m}_{Diesel} \cdot LHV_{Diesel} + \dot{m}_{H_2} \cdot LHV_{H_2}} \quad (2-7)$$

Para determinada fração de substituição de energia de hidrogênio *HES*, pode ser calculada a razão das vazões de óleo diesel e hidrogênio  $\dot{m}_{Diesel}/\dot{m}_{H_2}$ . Para compor a taxa de substituição requerida *HES*, é preciso ter a leitura da vazão de combustível diesel e, desta forma, pôde ser calculada a vazão de hidrogênio requerida. A Figura 2.1.4.1, mostra a razão das vazões de hidrogênio/diesel em função da fração de substituição em energia *HES* que precisou ser atendida.

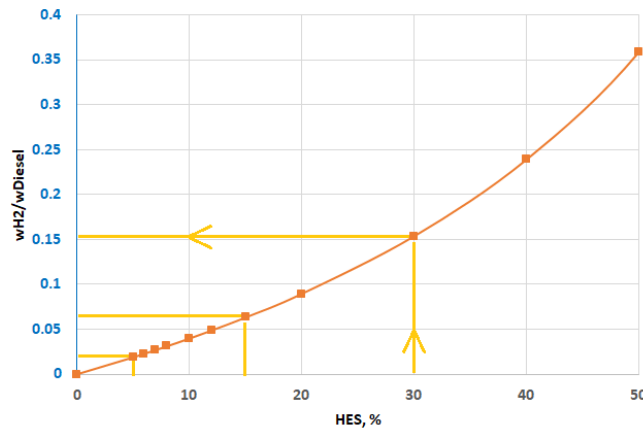


Figura 2.1.4.1 - Razão das vazões mássicas de hidrogênio e combustível diesel vs fração de substituição energética HES.

Na Tabela 8.1, foi investigada a relação das taxas de substituição máxima de hidrogênio em fração de energia percentual com a potência do motor CI aplicado nos ensaios e, os resultados são apresentados na Figura 2.1.4.2.

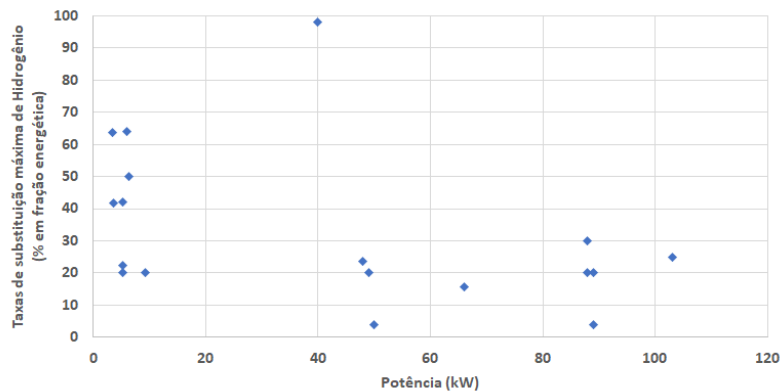


Figura 2.1.4.2 - Taxas de substituição máxima de hidrogênio em fração de energia percentual vs potência do motor CI

Ainda na Tabela 8.1, também foi investigada as faixas de substituição em energia do hidrogênio nos resultados dos ensaios realizados na literatura. Na contagem de ocorrências feito na Tabela 8.1, mostra-se que a maioria dos ensaios realizados foram com taxas reduzidas até 30%, como é verificado na Figura 2.1.4.3.

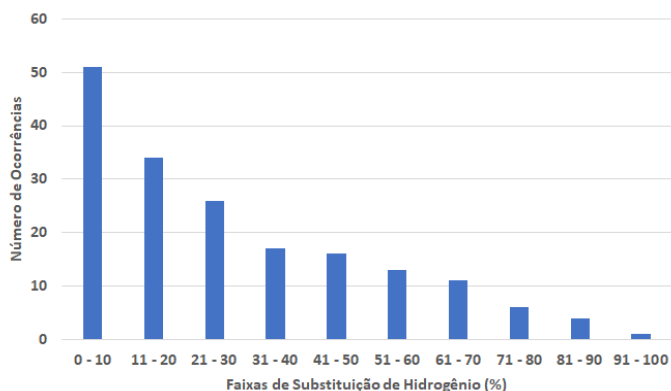


Figura 2.1.4.3 - Faixas de substituição de hidrogênio em fração de energia percentual vs ocorrências

### 2.1.5. Características da combustão

Na revisão da literatura, desde a primeira vez em que a substituição parcial de hidrogênio em motores de combustão IC foi proposta. Teoh et al. [9] verificaram que a utilização de hidrogênio como combustível, demonstra sua suscetibilidade a fenômenos de combustão anormais, incluindo pré-ignição, contra explosão no coletor de admissão (*backfire*), detonação e ignições espontâneas. Estas características foram investigadas na literatura e serão descritas a seguir.

#### 2.1.5.1. Atraso da ignição

Talibi et al. [18], observaram o efeito do período do instante de injeção de hidrogênio e da carga no atraso da ignição. A potência indicada do motor é proporcional à pressão média efetiva indicada ou *Indicated Mean Effective Pressure IMEP*. A Figura 2.1.5.1.1, mostra que o atraso da ignição para o diesel puro se manteve praticamente constante em 9,5 CAD de 0% a 33% de carga, e, a partir desse último ponto, o atraso de ignição diminuiu linearmente até o mínimo em 8,3 CAD quando a carga foi de 67%. Para o caso *diesel + H<sub>2</sub>*, o atraso de ignição se manteve constante em 10,6 CAD quando a carga variou de 0% a 33%, e, a partir desse último ponto, ao elevar a carga até 52%, o atraso de ignição cresceu para 11,2 CAD e, por fim, diminuiu para 10,3 CAD ao elevar a carga para 67%. Os outros casos com adição de hidrogênio tiveram resultados intermediários entre esses dois recém mencionados.

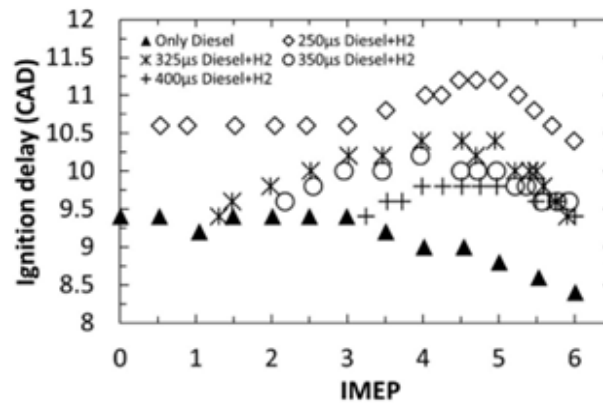


Figura 2.1.5.1.1 - Atraso de ignição (Ignition delay) em função da carga e do período de tempo de injeção de diesel [18]

Zhou et al. [20] observaram que o atraso de ignição para 10% de carga foi de 10,9; 11,1; 11,2; 11,5 e 11,4 CA para o diesel puro, *diesel* +  $H_2$  (10%), *diesel* +  $H_2$  (20%), *diesel* +  $H_2$  (30%) e *diesel* +  $H_2$  (40%), respectivamente. Ao elevar a carga para 50%, o atraso de ignição foi de 10,2; 10,4; 10,5; 10,7 e 10,5 CA para o diesel puro, *diesel* +  $H_2$  (10%), *diesel* +  $H_2$  (20%), *diesel* +  $H_2$  (30%) e *diesel* +  $H_2$  (40%), respectivamente. Com a elevação da carga para 70%, o atraso de ignição foi de 9,5; 9,6; 9,6; 9,6 e 9,2 CA para o diesel puro, *diesel* +  $H_2$  (10%), *diesel* +  $H_2$  (20%), *diesel* +  $H_2$  (30%) e *diesel* +  $H_2$  (40%), respectivamente. Por fim, na carga máxima de 90%, o atraso de ignição foi de 8,3; 8,3; 8,3; 5,4 e 5,1 para o diesel puro, *diesel* +  $H_2$  (10%), *diesel* +  $H_2$  (20%), *diesel* +  $H_2$  (30%) e *diesel* +  $H_2$  (40%), respectivamente.

### 2.1.5.2. Taxa de liberação de calor (*HRR*)

Em Talibi et al. [18], ao analisar a taxa de liberação de calor, foi observado que para a carga de 67% da potência máxima do motor, a combustão do diesel puro e da mistura *diesel* +  $H_2$  tiveram o mesmo *HRR* máximo de 96 J/deg, com os picos em 2 CAD (ATDC) e 6 CAD (ATDC), respectivamente. Já com 33% de carga, a combustão do diesel puro teve *HRR* máximo de 60 J/deg com pico em 3 CAD (ATDC). E, com essa mesma carga, a combustão do *diesel* +  $H_2$  teve *HRR* máximo de 26 J/deg com pico em 12 CAD (ATDC) e perfil de curva mais achatada.

Zhou et al. [20] observaram que a combustão do diesel puro, em 10% de carga, teve *HRR* máximo de 48 J/deg em 8 CA enquanto a combustão

do *diesel* +  $H_2$  (40%) teve *HRR* máximo de 44 J/deg em 8,5 CA. Com a elevação da carga para 50%, a combustão do diesel puro teve *HRR* máximo de 89 J/deg em 7,5 CA enquanto a combustão do *diesel* +  $H_2$  (40%) teve *HRR* máximo de 77 J/deg em 7,6 CA. Ao elevar a carga para 70%, foi observado que a combustão do diesel puro teve *HRR* máximo de 89 J/deg em 6,2 CA enquanto a combustão do *diesel* +  $H_2$  (40%) teve *HRR* máximo de 112 J/deg em 7,5 CA. Na carga máxima de 90%, a combustão do diesel puro teve *HRR* máximo de 89 J/deg em 8 CA enquanto a combustão do *diesel* +  $H_2$  (40%) teve *HRR* máximo de 136 J/deg em 5,5 CA, sendo os valores do ângulo do virabrequim dados após o ponto morto superior (ATDC). Para todos os casos, as misturas intermediárias de *diesel* +  $H_2$  tiveram *HRR* máximos entre os valores do diesel puro e do *diesel* +  $H_2$  (40%) de maneira ordenada, ou seja, o *HRR* para a combustão do *diesel* +  $H_2$  (10%) foi mais parecida com o *HRR* do diesel puro enquanto o *HRR* da combustão do *diesel* +  $H_2$  (30%) é mais parecida com o *HRR* do *diesel* +  $H_2$  (40%). A Figura 2.10 apresenta os resultados da taxa de liberação de calor em função da carga de operação, quantidade de HES (*Hydrogen Energy Share*) e ângulo do virabrequim.

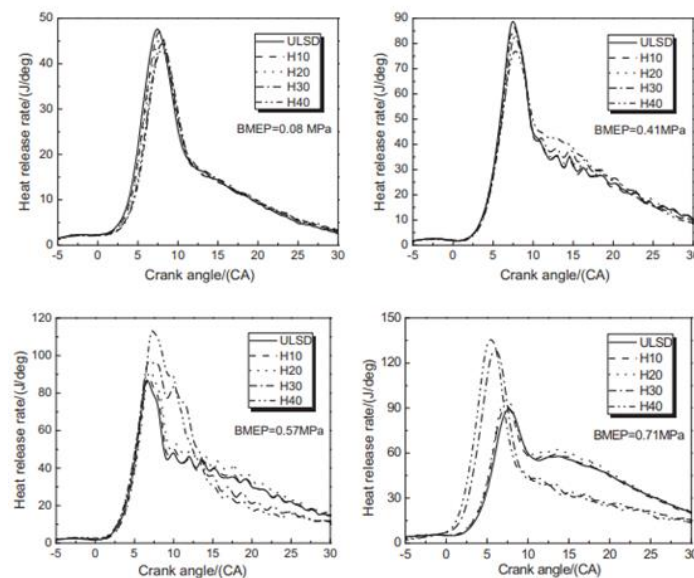


Figura 2.1.5.2.1 - Efeito da carga de operação e adição de hidrogênio na taxa de liberação de calor [20]

### 2.1.6. Métodos de adição/injeção do hidrogênio em motores CI



Devido à alta temperatura de autoignição, o uso direto de hidrogênio puro torna-se desafiador em motores de ignição por compressão, exigindo taxas de compressão irreais ou a necessidade de uma vela auxiliar na combustão, bem como a utilização de um combustível secundário em conjunto com uma baixa temperatura de autoignição. O hidrogênio possui baixa energia de ignição, podendo sofrer ignição facilmente por pontos quentes dentro da câmara, o que resulta em uma pré-ignição indesejada.

Na literatura, foram encontradas diferentes métodos de injeção sucedida de hidrogênio nos cilindros do motor de combustão, com sistemas que realizaram a formação da mistura combustível e injeção. Na análise da literatura que compõem os resultados apresentados nas Tabelas 8.1 e 8.2, foram realizadas a contagem das ocorrências dos métodos de injeção utilizados e descritos a seguir [9]:

- Carburação a gás (*fuel carburetion*) – 1 ocorrência;
- Injeção no coletor de ar (*injection at manifold*) – 23 ocorrências;
- Injeção na porta de admissão de ar (*port fuel injection PFI*);
- Injeção direta (*direct injection DI*).

Na literatura, há relatos da utilização de técnicas avançadas que envolvem o controle do tempo de injeção, dessa forma, foram apresentadas as técnicas: *timed manifold injection TMI* (4 ocorrências), *timed port injection TPI* (8 ocorrências). Uma técnica que não apresenta controle do tempo de injeção é denominada *continuous manifold injection CAM*.

Teoh et al. [9] encontraram relatos de situações que envolveram eventos de combustão no coletor de admissão (*backfire*), os quais são predominantes com hidrogênio pré-misturado em carburadores a gás observados em ensaios iniciais com  $H_2ICE$ . Para evitar os eventos mencionados, no lugar de utilizar sistemas com carburação a gás, foram propostos sistemas de injeção direta. Porém, a implementação desta técnica representa, modificações no sistema de injeção e a utilização de injetores de hidrogênio de elevada pressão e durabilidade. Com estas considerações, os métodos mencionados acima foram preferíveis.

## 2.2. Efeito da adição de hidrogênio nas emissões de motores *CI*

Motores a diesel de ignição por compressão são muito conhecidos por emitirem uma alta carga de material particulado e  $NO_x$ , porém possuem altas eficiências térmicas [6]. Diversos estudos foram realizados relativos a otimização desse tipo de motor utilizando misturas de diesel com gás natural, hidrogênio ou ambos. Todas essas abordagens demonstraram ser eficazes principalmente na redução de emissões de  $HC$ ,  $NO_x$  e material particulado. Utilizando motores com tecnologia dual fuel hidrogênio-diesel as emissões de  $CO$ ,  $NO_x$  e fumaça também diminuiriam significativamente. No entanto, em alguns casos após a adição de hidrogênio, também foi observado aumento das emissões de  $NO_x$  e diminuição da eficiência térmica do motor, uma vez que essa adição depende de uma série de variáveis como taxa de excesso de ar, carga do motor, tempo de injeção de combustível, etc [7]. Por exemplo, utilizando-se uma velocidade constante de 1300 rpm do motor, 5,1 kW de potência indicada e variando a fração de hidrogênio com 16%, 36% e 46%, os valores de emissão de fumaça específicos diminuiriam respectivamente em 57,8%, 70,4% e 75,2% em comparação com o uso apenas do diesel [8].

### 2.2.1. Monóxido de carbono $CO$

Sobre os resultados das emissões de monóxido de carbono  $CO$  na operação bicomcombustível diesel-hidrogênio apresentados na Tabela 8.2, 14 publicações apresentaram resultados de redução favorável deste índice e, apenas um trabalho de simulação numérica [23], indica resultados desfavoráveis. Aldhaidhawi et al. [24] observaram que o índice de  $CO$  na composição dos gases de exaustão diminui em reduzidas velocidades de rotação do motor e aumenta com o incremento, em velocidades elevadas. Barrios et al. [25] reportaram índices comparáveis à operação sem adição de hidrogênio em todas as velocidades rotacionais e cargas do motor. Rahman et al. [26] também observaram que este índice se mantém constante em ensaios realizados com *EGR*.

Talibi et al. [18] observaram que no motor que operou somente com diesel puro, houve formação crescente de  $CO$  de 0% a 38,9% de carga,

porém a partir desse último ponto observou-se uma concentração de 950 ppm que decresce assintoticamente para 220 ppm quando a carga é de 67%. Quando o motor operou com *diesel* (250  $\mu$ s) +  $H_2$ , observou-se formação de *CO* durante toda a faixa de carga testada, iniciando com 1000 ppm até 11% de carga, evoluindo para o pico de *CO* em 1100 ppm com 16,7% de carga, e reduzindo assintoticamente para 0 ppm quando 50% de carga é atingida.

Bose et al. [19] observaram que a adição de hidrogênio foi benéfica em todos os casos testados. Assim, com o motor em marcha lenta (*idle*), foi observado 0,3% e 0,04% de *CO* para o diesel puro e para o *diesel* +  $H_2$ , respectivamente. Ao impor uma baixa carga de 20%, foi observado que houve 0,23% de *CO* para o diesel e 0,07% de *CO* para o *diesel* +  $H_2$ . Ao elevar a carga para 40%, foi observado 0,27% de *CO* para o diesel enquanto o *diesel* +  $H_2$  apresentou 0,1% de *CO*. Com a elevação da carga para 60%, o diesel puro teve 0,45% de *CO* enquanto o *diesel* +  $H_2$  teve 0,23% de *CO*. Já na carga máxima de 80%, foi observado 0,85% e 0,45% de *CO* para o diesel e para o *diesel* +  $H_2$ , respectivamente. A Figura 2.2.1.1 mostra graficamente essa descrição.

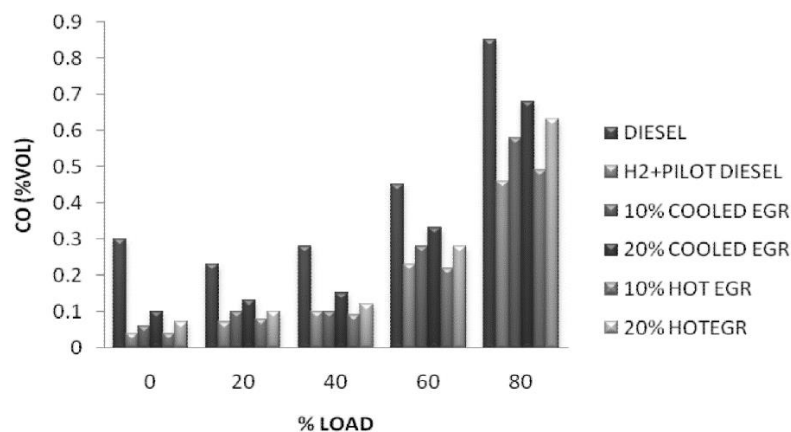


Figura 2.2.1.1 - Variação das emissões de monóxido de carbono em função da carga [19]

Zhou et al. [20] observaram que para todos os casos testados, a adição de hidrogênio também foi benéfica na redução de *CO*, de modo que o *Brake Specific CO*, em 10 % de carga, foi de 8,2 g/kWh para o diesel puro enquanto o *BSCO* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 5,3 g/kWh. Com a elevação da carga para 30%, foi observado que o *BSCO* do diesel puro foi de 3,1

g/kWh enquanto o *BSCO* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 1,4 g/kWh. Para a carga de 50%, o *BSCO* do diesel puro foi de 1,7 g/kWh enquanto o *BSCO* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 0,9 g/kWh. Ao elevar a carga para 70%, o *BSCO* do diesel puro foi de 1,0 g/kWh enquanto o *BSCO* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 0,3 g/kWh. Por fim, na carga máxima de 90%, o *BSCO* do diesel puro foi de 1,4 g/kWh enquanto o *BSCO* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 0,5 g/kWh. As outras misturas de *diesel* +  $H_2$  tiveram *BSCO* intermediário e decrescente com a elevação de *HES* entre as citadas.

Jhang et al. [21] observaram que a média de redução na emissão de *CO* em baixa rotação foi de 3,93% e 6,72% com as contribuições de 0,6% e 1,2% de fração de volume de hidrogênio no ar de admissão, respectivamente. Comportamentos similares são observados em cargas parciais de operação do motor. Entretanto, esse efeito da adição de hidrogênio não é visível quando o motor está operando com carregamento de 50% e 75%.

Serin e Yıldızhan [22] observaram que a adição de hidrogênio foi benéfica na redução de emissão de *CO*, de modo que em 1200 RPM a concentração de *CO* foi de 217 ppm com B20 puro e de 140 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1400 RPM a concentração de *CO* foi de 221 ppm com B20 puro e de 146 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1600 RPM, a concentração de *CO* foi de 239 ppm com B20 puro e de 152 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1800 RPM a concentração de *CO* foi de 237 ppm com B20 puro e de 155 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2000 RPM a concentração de *CO* foi de 253 ppm com B20 puro e de 173 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2200 RPM a concentração de *CO* foi de 274 ppm com B20 puro e de 179 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2400 RPM a concentração de *CO* foi de 305 ppm com B20 puro e de 201 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2600 RPM a concentração de *CO* foi de 333 ppm com B20 puro e de 240 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio. E, por fim, com 2800 RPM, a concentração de *CO* foi de 372 ppm com B20 puro e de 305 ppm com B20 + 10 LPM de hidrogênio.

### 2.2.2. Dióxido de carbono $CO_2$

A respeito das emissões de dióxido de carbono  $CO_2$ , também, a maioria dos trabalhos publicados indicaram a redução deste índice na composição dos gases de exaustão. Dos trabalhos apresentados na Tabela 8.2, 27 autores indicam a redução do  $CO_2$  e, 3 o aumento [18, 26, 27]. Em ensaios com *EGR*, Rahman et al. [26] observaram a redução do dióxido de carbono na composição dos gases de exaustão.

Talibi et al. [18] observaram que a quantidade de  $CO_2$  aumentou com tendência linear de 0,5% para 7,5% quando a carga cresceu de 0% a 67% da potência nominal quando o motor operou somente com diesel. Para o caso de maior substituição de diesel por hidrogênio, ou seja, o caso onde o diesel é injetado por 250  $\mu s$  e o hidrogênio fornece energia complementar para variar a carga, a quantidade de  $CO_2$  aumentou com tendência linear de 0,5% para 1,6% quando a carga variou de 0% a 67% da potência nominal. Os outros casos podem ser analisados melhor na Figura 2.2.2.1.

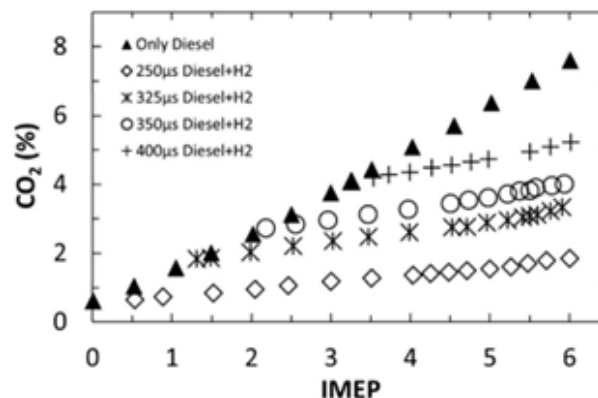


Figura 2.2.2.1 - Formação de dióxido de carbono em função da carga e do período de injeção de diesel [18]

Bose et al. [19] observaram que para todas as cargas testadas, a adição de hidrogênio foi benéfica na redução de  $CO_2$ . Com o motor em *idle* (0% de carga), foi observado 2,5% e 0,7% de  $CO_2$  para o diesel puro e para o *diesel* +  $H_2$ , respectivamente. Ao impor uma baixa carga de 20%, foi observado que houve 3,8% de  $CO_2$  para o diesel e 1,1% de  $CO_2$  para o *diesel* +  $H_2$ . Ao elevar a carga para 40%, foi observado 5,4% de  $CO_2$  para o diesel enquanto o *diesel* +  $H_2$  apresentou 3,0% de  $CO_2$ . Com a elevação da carga para 60%, o diesel puro teve 6,1% de  $CO_2$  enquanto o *diesel* +  $H_2$

teve 3,7% de  $CO_2$ . Já na carga máxima de 80%, foi observado 7,9% e 4,7% de  $CO_2$  para o diesel e para o *diesel* +  $H_2$ , respectivamente.

Zhou et al. [20] observaram que a adição de hidrogênio foi benéfica na redução de emissões  $CO_2$ , de modo que em 10 % de carga, foi observado que o *Brake Specific  $CO_2$  ( $BSCO_2$ )* do diesel puro foi de 1440 g/kWh enquanto o  $BSCO_2$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 1100 g/kWh. Com a elevação da carga para 30%, foi observado que o  $BSCO_2$  do diesel puro foi de 800 g/kWh enquanto o  $BSCO_2$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 590 g/kWh. Para a carga de 50%, o  $BSCO_2$  do diesel puro foi de 730 g/kWh enquanto o  $BSCO_2$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 420 g/kWh. Ao elevar a carga para 70%, o  $BSCO_2$  do diesel puro foi de 650 g/kWh enquanto o  $BSCO_2$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 400 g/kWh. Por fim, na carga máxima de 90%, o  $BSCO_2$  do diesel puro foi de 690 g/kWh enquanto o  $BSCO_2$  do *diesel* +  $H_2$  (30%) foi de 410 g/kWh. As outras misturas de *diesel* +  $H_2$  tiveram  $BSCO_2$  intermediário e decrescente com a elevação de *HES* entre as citadas.

Jhang et al. [21] observaram que os resultados para emissões de  $CO_2$  foram beneficiados pela a substituição de diesel por hidrogênio em todas as condições de operação, de modo que a menor quantidade de  $CO_2$  foi registrada a 75% de carga com 1,2% de fração de volume de hidrogênio no ar de admissão.

Serin e Yıldızhan [22] observaram que a adição de hidrogênio foi benéfica na redução de emissão de  $CO_2$ , de modo que com 1200 RPM a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro foi de 8,23% enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 7,11%. Com 1400 RPM a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro, foi de 8,32% enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 7,20%. Com 1600 RPM a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro, foi de 8,31 % enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 7,17%. Com 1800 RPM, a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro foi de 9,40% enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 8,15%. Com 2000 RPM, a porcentagem de  $CO_2$  da combustão do B20 puro foi de 9,15% enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 7,91%. Com 2200 RPM, a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro foi de 8,16%

enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 7,11%. Com 2400 RPM, a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro foi de 6,98% enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 6,04%. Com 2600 RPM a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro foi de 7,18% enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 6,00%. E, por fim, com 2800 RPM, a porcentagem de emissão de  $CO_2$  do B20 puro foi de 6,80% enquanto a do B20 + 10 LPM de hidrogênio foi de 5,81%.

### 2.2.3. Óxidos de nitrogênio $NO_x$

Ao contrário da redução observada dos índices de  $CO$  e  $CO_2$  na operação bicom bustível, na Tabela 8.2, os resultados de 20 artigos apresentam o aumento dos índices de óxidos de nitrogênio  $NO_x$  na composição dos gases do escapamento do motor e, 8 trabalhos indicam a redução. Jhang et al. [21] e Tsujimura e Suzuki [15], observaram a redução dos índices de  $NO_x$  em cargas reduzidas e o aumento, na operação do motor em maiores cargas. Yilmaz e Gumus [27] fizeram ensaios injetando hidrogênio com vazões que foram mantidas constantes de 20 LPM (H20) e 40 LPM (H40) mudando o torque do motor CI, para os valores 50, 75 e 100 N·m. Este autor, observou que o índice de  $NO_x$ , no caso do cenário com  $H_2O$ , há uma redução do índice de  $NO_x$  nos torques mencionados acima. No caso do ensaio com H40, há um incremento das emissões de  $NO_x$  nos torques de 50 e 75 N·m e uma redução não significativa no torque de 100 N·m. Nagarajan e Saravanan [28] realizaram ensaios com difrentes técnicas de injeção de hidrogênio como: carburador a gás, *TPI* e *TMI*. No caso da adição de hidrogênio em carburador a gás, em reduzidas cargas de 25% e 50%, relataram uma redução dos índices de  $NO_x$  e, com cargas maiores de 75% e 100% o aumento deste índice. Com os métodos de injeção de hidrogênio *TPI* e *TMI*, observaram o aumento dos índices de  $NO_x$  em todas as cargas, exceto na menor carga de 25%. Resultados similares foram obtidas por Talibi et al. [18] e Sharma e Dhar [29], que relataram uma redução dos índices em cargas reduzidas e o aumento em cargas maiores. Contrariamente, Dimitriou et al. [16, 30] em dois trabalhos publicados, relataram que em carga reduzida o índice de  $NO_x$  aumenta e, somente diminui quando a fração de substituição de hidrogênio é maior que

80%. Por outro lado, em cargas maiores observou os resultados contrários. Suzuki e Tsujimura [31], relataram que o índice de  $NO_x$  diminui em cargas reduzidas, não há variação em média carga e aumenta em cargas maiores. Aldhaidhawi et al. [24] relataram que em operação bicom bustível biodiesel-hidrogênio e em plena carga, em regime de velocidade rotacional de 1400 RPM os índices de  $NO_x$  diminuem e em 2400 RPM observou o aumento dos índices.

Talibi et al. [18] praticamente não observaram formação de  $NO_x$  até 22% de carga. A partir desse limite, ao elevar a carga continuamente, o diesel puro mostrou um crescimento de tendência linear na concentração de  $NO_x$  até a carga máxima testada de 67%, onde a concentração de  $NO_x$  foi de 1700 ppm. Para o caso do *diesel* (250  $\mu$ s) +  $H_2$ , observou-se que formação de  $NO_x$  é praticamente nula até 44,4% de carga, e, em seguida, cresce com tendência exponencial até 3150 ppm quando a carga é de 67%. Vale ressaltar que ambos os casos se igualam em formação de  $NO_x$  quando a carga é de 61% com concentração de 1500 ppm de  $NO_x$ .

Bose et al. [19] observaram que há o aumento da formação de  $NO_x$  com a adição de hidrogênio para todas as cargas testadas, de modo que com o motor em *idle* foi observado 90 ppm e 140 ppm de  $NO_x$  para o diesel puro e para o *diesel* +  $H_2$ , respectivamente. Ao impor uma baixa carga de 20%, foi observado que houve 360 ppm de  $NO_x$  para o diesel e 610 ppm de  $NO_x$  para o *diesel* +  $H_2$ . Ao elevar a carga para 40%, foi observado 650 ppm de  $NO_x$  para o diesel enquanto o *diesel* +  $H_2$  apresentou 1160 ppm de  $NO_x$ . Com a elevação da carga para 60%, o diesel puro teve 650 ppm de  $NO_x$  enquanto o *diesel* +  $H_2$  teve 1170 ppm de  $HC$ . Já na carga máxima testada de 80%, foi observado 820 ppm e 1210 ppm de  $NO_x$  para o diesel e para o *diesel* +  $H_2$ , respectivamente.

Zhou et al. [20] observaram que o *Brake Specific  $NO_x$*  ( $BSNO_x$ ), em 10 % de carga, foi de 7,1 g/kWh para o *diesel* +  $H_2$  (20%) enquanto o  $BSNO_x$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 6,7 g/kWh. Com a elevação da carga para 30%, foi observado que o  $BSNO_x$  do *diesel* +  $H_2$  (20%) foi de 4,1 g/kWh enquanto o  $BSNO_x$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 3,9 g/kWh. Para a carga de 50%, o



$BSNO_x$  do *diesel* +  $H_2$  (20%) foi de 4,4 g/kWh enquanto o  $BSNO_x$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 4,2 g/kWh. Ao elevar a carga para 70%, o  $BSNO_x$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 5,6 g/kWh enquanto o  $BSNO_x$  do diesel puro foi de 4,5 g/kWh. Por fim, na carga máxima de 90%, o  $BSNO_x$  do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 4,7 g/kWh enquanto o  $BSNO_x$  do diesel puro foi de 3,6 g/kWh.

Jhang et al. [21] observaram que a adição de hidrogênio reduz as emissões de  $NO_x$  à baixas rotações em 25% de carga, porém essa adição aumenta as emissões de  $NO_x$  em médias e altas cargas.

Serin e Yıldızhan [22] observaram que a adição de hidrogênio aumentou a quantidade de  $NO_x$ . Isso porque com 1200 RPM a concentração de  $NO_x$  foi de 1360 ppm para o B20 puro e de 1711 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1400 RPM, a concentração de  $NO_x$  foi de 1302 ppm para o B20 puro e de 1604 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1600 RPM a concentração de  $NO_x$ , foi de 1302 ppm para o B20 puro e de 1622 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 1800 RPM a concentração de  $NO_x$  foi de 1293 ppm para o B20 puro e de 1609 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2000 RPM a concentração de  $NO_x$  foi de 1182 ppm para o B20 puro e de 1458 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2200 RPM a concentração de  $NO_x$  foi de 1164 ppm para o B20 puro e de 1444 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2400 RPM a concentração de  $NO_x$  foi de 1076 ppm para o B20 puro e de 1316 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Com 2600 RPM a concentração de  $NO_x$  foi de 987 ppm para o B20 puro e de 1218 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. E, por fim, com 2800 RPM a concentração de  $NO_x$  foi de 933 ppm para o B20 puro e de 1124 ppm para o B20 + 10 LPM de hidrogênio. Esse comportamento se observa na Figura 2.2.3.1.

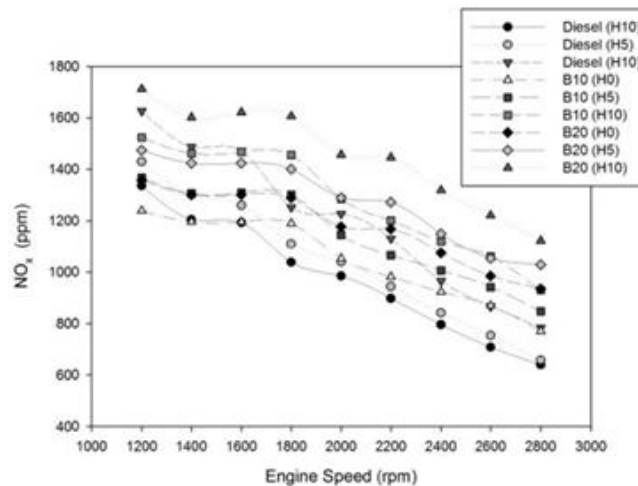


Figura 2.2.3.1 - Variação da concentração de  $NO_x$  em função da rotação do motor e da mistura de combustível [22]

#### 2.2.4. Hidrocarbonetos não queimados $HC$

Sobre as emissões de compostos formados de carbono e hidrogênio ou hidrocarbonetos  $HC$ , na Tabela 8.2, foram reportados em 16 trabalhos a redução destes compostos nas emissões e, em 10 trabalhos o aumento. Aldhaidhawi et al. [24], relataram o incremento das emissões de  $HC$  em reduzidas velocidades de rotação do motor CI e observou a redução dos compostos de  $HC$  em maiores velocidades de rotação. Por outro lado, Jhang et al. [21] observaram que os compostos de  $HC$  aumentam em toda a faixa de cargas exceto em marcha lenta (*idle*). Nos resultados de Talibi et al. [32] e Hernandez et al. [33], não foram observados a variação aparente dos compostos de  $HC$  variando a fração de substituição em energia do hidrogênio. Dimitriou et al. [16], em ensaios realizados com  $EGR$  e carga elevada, relataram o incremento dos compostos de  $HC$  com elevadas frações de substituição de hidrogênio maior que 80% em fração em energia.

Talibi et al. [18] observaram que a formação de hidrocarbonetos diminui com o aumento da carga e com a adição de hidrogênio. De maneira geral, todos os casos testados possuem concentração de 200 ppm de hidrocarbonetos com 67% de carga. Contudo, em baixas cargas, observou-se uma maior dispersão dos resultados entre os casos testados, de modo que o diesel puro emitiu 1100 ppm enquanto o *diesel* (250  $\mu s$ ) +  $H_2$  emitiu 700 ppm, ambos a 5,6% de carga.

Bose et al. [19] observaram que a adição de hidrogênio foi benéfica na redução de hidrocarbonetos não queimados para todos os casos. Assim, com o motor em *idle*, foi observado 100 ppm e 16 ppm de *HC* para o diesel puro e para o *diesel + H<sub>2</sub>*, respectivamente. Ao impor uma baixa carga de 20%, foi observado que houve 110 ppm de *HC* para o diesel e 22 ppm de *HC* para o *diesel + H<sub>2</sub>*. Ao elevar a carga para 40%, foi observado 105 ppm de *HC* para o diesel enquanto o *diesel + H<sub>2</sub>* apresentou 44 ppm de *HC*. Com a elevação da carga para 60%, o diesel puro teve 116 ppm de *HC* enquanto o *diesel + H<sub>2</sub>* teve 45 ppm de *HC*. Já na carga máxima de 80%, foi observado 130 ppm e 55 ppm de *HC* para o diesel e para o *diesel + H<sub>2</sub>*, respectivamente.

Zhou et al. [20] apresentaram a quantidade de hidrocarbonetos emitidos em *Brake Specific HC* (*BSHC*), e observaram que em 10 % de carga, o *BSHC* do *diesel + H<sub>2</sub>* (10%) e *diesel + H<sub>2</sub>* (20%) foram de 8,7 g/kWh enquanto o *BSHC* do *diesel + H<sub>2</sub>* (40%) foi de 6,3 g/kWh. Com a elevação da carga para 30%, foi observado que os *BSHC* dos *diesel + H<sub>2</sub>* (10%) e *diesel + H<sub>2</sub>* (20%) foram de 2,9 g/kWh enquanto o *BSHC* do *diesel + H<sub>2</sub>* (40%) foi de 2,2 g/kWh. Para essas duas cargas mencionadas, as outras misturas de *diesel + H<sub>2</sub>* e diesel puro tiveram *BSHC* intermediário entre as citadas. Já para as cargas de 50%, 70% e 90%, todos os casos de combustíveis testados tiveram resultados de *BSHC* semelhantes de 1,4 g/kWh, 0,8 g/kWh e 0,5 g/kWh, respectivamente.

Jhang et al. [21] observaram que a adição de hidrogênio reduziu o nível de emissões de hidrocarbonetos não queimados quando o motor operou em baixa rotação. Contudo, conforme mostra a Figura 2.2.4.1 para os outros níveis de carga testados, a adição de hidrogênio aumentou as emissões hidrocarbonetos em 4,94% e 13,1%, quando o hidrogênio foi injetado a 0,6% e 1,2% de fração volumétrica do ar de admissão, respectivamente.

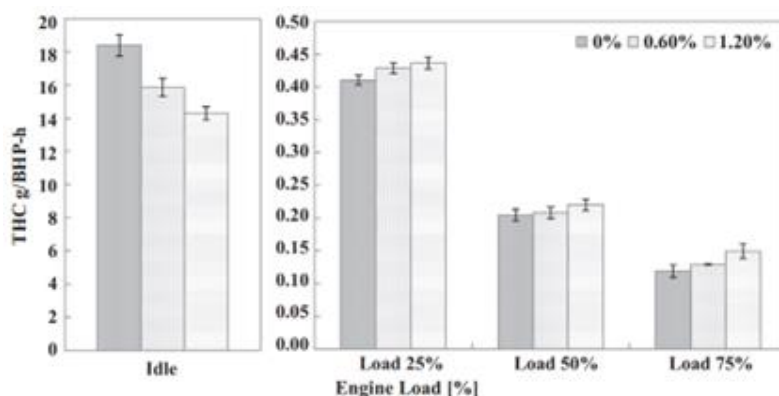


Figura 2.2.4.1 - Variação da emissão de hidrocarbonetos em função da carga de operação do motor e da porcentagem volumétrica de hidrogênio no ar de admissão [21]

### 2.2.5. Fuligem, fumaça e material particulado

No que diz respeito à fuligem, na Tabela 8.2 foram encontradas 7 publicações nas quais indicam que este material tem suas emissões reduzidas [15, 16, 18, 23, 33–35]. Por outro lado, Suzuki e Tsujimura [31] relataram que, em carga reduzida e *HES* menor que 60%, a fuligem aumenta, porém, com maiores cargas, há redução da fuligem. Dimitriou et al. [30] também reportaram que há aumento da fuligem com valores de *HES* < 80% e somente foi observado uma redução com *HES* = 80%.

Sobre a fumaça, todos os trabalhos apresentados na Tabela 8.2, relataram a redução deste componente nas emissões quando operava no modo bicom bustível. Rahman et al. [26], também reportaram a redução da fumaça em ensaios sem *EGR*. Por outro lado, em cargas elevadas e utilizando *EGR* registrou-se o aumento da fumaça nos gases de escapamento.

Bose et al. [19] observaram que a adição de hidrogênio foi benéfica na redução da opacidade da fumaça em todas as cargas testadas. Com o motor em *idle*, foi observado 0,55 HSU e 0,25 HSU para o diesel puro e para o *diesel* + *H*<sub>2</sub>, respectivamente. Ao impor uma baixa carga de 20%, foi observado que houve 0,65 HSU para o diesel e 0,24 HSU para o *diesel* + *H*<sub>2</sub>. Ao elevar a carga para 40%, foi observado 1,4 HSU para o diesel enquanto o *diesel* + *H*<sub>2</sub> apresentou 0,55 HSU. Com a elevação da carga para 60%, o diesel puro teve 2,95 HSU enquanto o *diesel* + *H*<sub>2</sub> teve 1,65 HSU. Já na carga máxima de 80%, foi observado 4,8 HSU e 2,8 HSU para o diesel e para o *diesel* + *H*<sub>2</sub>, respectivamente.

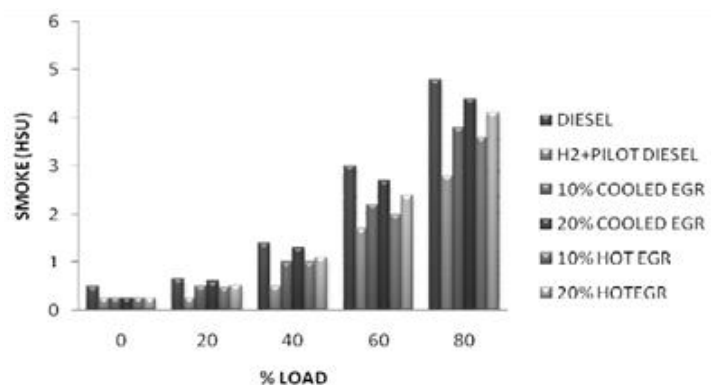


Figura 2.2.5.1 - Variação da emissão de fumaça em função da carga e da mistura de combustível [19]

Talibi et al. [18] observaram que em todos os casos testados a adição de hidrogênio foi benéfica para reduzir a formação de material particulado. De maneira descritiva, a formação de material particulado teve pico em 16,7% de carga sendo  $0,035 \mu\text{g/cc}$  e  $0,01 \mu\text{g/cc}$  para diesel puro e *diesel* +  $H_2$ , respectivamente. Para o intervalo de carga entre 22% e 56%, a formação de material particulado se manteve praticamente constante em valores mínimos de  $0,01 \mu\text{g/cc}$  e  $0,002 \mu\text{g/cc}$  para diesel puro e *diesel* +  $H_2$ , respectivamente. Quando a carga atingiu 67%, a formação de particulado subiu ligeiramente para  $0,013 \mu\text{g/cc}$  e  $0,004 \mu\text{g/cc}$  para diesel puro e *diesel* +  $H_2$ , respectivamente.

Zhou et al. [20] observaram que a adição de hidrogênio foi benéfica na redução da formação de material particulado em médias e altas cargas, já que em 10 % de carga, o *Brake Specific Particulate Matter (BSPM)* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 380 mg/kWh enquanto o *BSPM* do diesel puro foi de 240 mg/kWh. Com a elevação da carga para 30%, foi observado que o *BSPM* do diesel puro foi de 130 mg/kWh enquanto o *BSPM* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 70 mg/kWh. Para a carga de 50%, o *BSPM* do diesel puro foi de 155 mg/kWh enquanto o *BSPM* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 45 mg/kWh. Ao elevar a carga para 70%, o *BSPM* do diesel puro foi de 245 mg/kWh enquanto o *BSPM* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 50 mg/kWh. Por fim, na carga máxima de 90%, o *BSPM* do diesel puro foi de 380 mg/kWh enquanto o *BSPM* do *diesel* +  $H_2$  (40%) foi de 145 mg/kWh. Os outros combustíveis testados tiveram *BSPM* intermediário e ordenado entre as citadas, como pode ser visto na Figura 2.2.5.2.

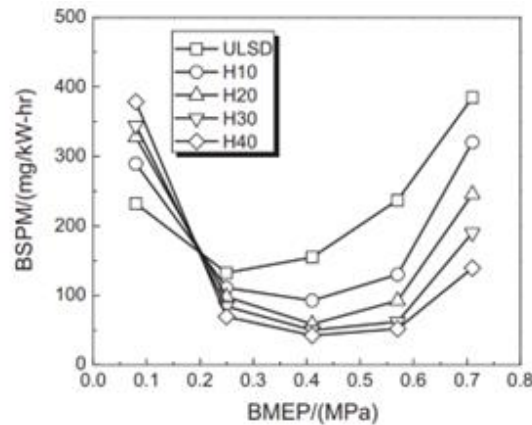


Figura 2.2.5.2 - Variação da emissão de material particulado em função da carga de operação do motor e das misturas de combustíveis [20]

## 2.2.6. Conclusões Parciais

Sobre a eficiência térmica  $BTE$ , não houve uma clara indicação do efeito positivo na injeção de hidrogênio em motores de combustão CI. Entretanto, são conhecidas as informações das condições de operação do motor no qual este parâmetro de avaliação diminuiu. No que diz respeito ao consumo específico  $BSFC$ , a maioria dos trabalhos analisados neste relatório indicaram uma redução quantitativa deste parâmetro importante. Da mesma forma, foi encontrado que o consumo específico de energia  $BSEC$  diminuiu na maioria dos trabalhos analisados.

Sobre as emissões de  $CO$  e  $CO_2$ , a quase totalidade dos trabalhos que avaliaram estes compostos nos gases de exaustão do motor indicaram a redução destes poluentes emitidos na atmosfera. Os trabalhos que apresentaram resultados adversos realizaram os ensaios em condições extremas de operação. Sobre as emissões de  $NO_x$ , há indicações de que este parâmetro de avaliação aumenta, porém, há também informações das condições em que isto acontece. Esses resultados comprovam a necessidade de ajustar o teor de  $H_2$  empregado em função das condições de operações de maneira a ter o perfil de emissões mais limpo.

Os dados da literatura demonstram que, a substituição de hidrogênio até 30% em fração de energia independentemente da carga, é tecnicamente viável e segura. Entretanto, para maiores taxas de substituição, é preciso realizar mais pesquisas sobre a operação, segurança e questões relacionadas à metalurgia dos componentes

metálicos, os quais não devem ser susceptíveis a fragilização pelo hidrogênio (*hydrogen embrittlement*).

### 3. MODELAGEM MATEMÁTICA

A modelagem matemática segue a metodologia da Minimização da Energia Livre de Gibbs para prever a formação de compostos como hidrogênio ( $H_2$ ), monóxido de carbono ( $CO$ ), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), água ( $H_2O$ ) e monóxido de nitrogênio ( $NO$ ). Todos os cálculos foram realizados via MATLAB, com a intenção de otimizar o tempo de cálculo, além de ter maior confiabilidade nos resultados obtidos.

Uma análise termodinâmica da formação dos compostos acima a partir da combustão incompleta do Diesel B12 com injeções parciais (HES = 0%, 5%, 15% e 30%) de hidrogênio ( $H_2$ ) foi realizada através do Método de Minimização de Energia Livre de Gibbs sob condições de temperatura e razão de ar por combustível.

As faixas estudadas são:

- Temperatura de 700 K a 1200 K
- Razão ar/combustível de 2,8379 à 4,3951

A energia livre total de Gibbs de um sistema pode ser expressa da seguinte forma [44],

$$G = \sum_{i=1}^{NC} n_i \cdot \mu_i \quad (3-1)$$

onde,  $n_i$  é o número de mols de equilíbrio para as espécies  $i$  e  $\mu_i$  é o potencial químico que pode ser expresso como [44]:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln \left( \frac{\hat{f}_i}{f_i^0} \right) \quad (3-2)$$

onde,  $\mu_i^0$  é o potencial químico do componente  $i$  na temperatura de referência,  $f_i^0$  é a fugacidade do componente puro no estado de referência e  $\hat{f}_i$  é a fugacidade do componente  $i$  na mistura que pode ser obtida por [44]:

$$\hat{f}_i = \hat{\phi} \cdot y_i \cdot P \quad (3-3)$$

onde,  $y_i$  é a fração molar do componente  $i$  em equilíbrio e  $\hat{f}_i$  é o coeficiente de fugacidade do componente  $i$  que é muito próximo de 1 em baixa pressão e alta temperatura, já  $P$  é a pressão de referência para o processo.



Assumindo  $\hat{f}_i = 1$  e submetendo-os de volta à Eqs. 3-1 e 3-3 pode ser obtido [44],

$$G = \sum_{i=1}^{NC} n_i \cdot (\mu_i^0 + RT(\ln y_i + \ln P)) \quad (3-4)$$

O potencial químico de referência  $\mu_i^0$  do componente puro  $i$  pode ser calculado usando as seguintes relações termodinâmicas conhecidas [44]:

$$\left(\frac{\partial H_i}{\partial T}\right)_P = C_{pi} \quad (3-5)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{G_i}{RT}\right)_P = -\frac{\bar{H}_i}{RT^2} \quad (3-6)$$

$$\bar{G}_i = \mu_i \quad (3-7)$$

Depois de resolver diretamente as Eqs. 3-5 e 3-6 para gases à pressão atmosférica padrão, a seguinte equação pode ser obtida [44],

$$\begin{aligned} \mu_i^0(T) = & \left(\frac{T}{T_0}\right) \Delta G_{fi}^0 + \left(1 - \frac{T}{T_0}\right) \Delta H_{fi}^0 - a_i \left(T \ln \frac{T}{T_0} - T + T_0\right) \\ & - \frac{b_i}{2} (T^2 - 2T_0T + T_0^2) - \frac{c_i}{6} (T^3 - 3T_0^2T + 2T_0^3) \\ & - \frac{d_i}{2} (T^4 - 4T_0^3T + 3T_0^4) - \frac{e_i}{20} (T^5 - 5T_0^4T + 4T_0^5) \end{aligned} \quad (3-8)$$

onde, os valores de  $\Delta G_{fi}^0$ ,  $\Delta H_{fi}^0$ ,  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$ ,  $d_i$  (constantes para expressão polinomial de  $C_{pi}$ ) são retirados de bancos de dados [44].

Para implementação dessas constantes da expressão polinomial no código MATLAB, foi preciso fazer algumas conversões. À seguir, na Tabela 3.1, é mostrado as massas molares das substâncias em kg/k.mol utilizadas para conversão, os valores correspondentes as constantes  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$  e  $d_i$  em kJ/kg.K retirados da referência [44] que, em seguida, foram chamadas de A, B, C e D em J/mol.kg.

Tabela 3.1 - Conversão dos coeficientes  $a_i, b_i, c_i, d_i$  em kJ/kg.K encontrados na referência [44] para os coeficientes A, B, C e D que foram implementados no código de MATLAB em J/mol.kg

Substância	Massa molar (kg/kmol)	a <sub>i</sub>	b <sub>i</sub>	c <sub>i</sub>	d <sub>i</sub>	A	B	C	D
CO	28,1000	1,10	-0,46	1,00	-0,45	30,9100	-1,2926E-02	2,8100E-05	-1,2757E-08
H2O	18,0150	1,79	0,11	0,59	-0,20	32,2469	1,9276E-03	1,0557E-05	-3,6030E-09
CO2	44,0100	0,45	1,67	-1,27	0,39	19,8045	7,3497E-02	-5,5893E-05	1,7164E-08
H2	2,0160	13,46	4,60	-6,85	3,79	27,1354	9,2736E-03	-1,3810E-05	7,6406E-09
CH4	16,0430	1,20	3,25	0,25	-0,71	19,2516	5,2140E-02	4,0108E-06	-1,1391E-08
O2	31,9990	0,88	0,00	0,54	-0,33	28,1591	-3,1999E-06	1,7279E-05	-1,0560E-08
N2	28,0130	1,11	-0,48	0,96	-0,42	31,0944	-1,3446E-02	2,6892E-05	-1,1765E-08
NO	30,0060	0,98	-0,03	0,33	-0,14	29,4059	-9,3019E-04	9,7520E-06	-4,2008E-09

Como o carbono é sólido e não tem pressão de vapor, a energia livre total de Gibbs, incluindo o carbono, é expressa como [44]:

$$G = \sum_{i=1}^{NC-1} n_i \cdot (\mu_i^0 + RT(\ln y_i + \ln P)) + n_C \cdot \mu_C^0 \quad (3-9)$$

onde  $n_C$  representa as moles de equilíbrio de carbono e  $\mu_C^0$  o potencial químico de referência do carbono. Na minimização de energia livre de Gibbs, algumas restrições devem ser satisfeitas:

- 1) não negatividade do número de moles:

$$n_i \geq 0, i = 1, \dots, NC \quad (3-10)$$

onde, NC é o número de componentes.

- 2) O balanço de massa de cada átomo deve satisfazer a restrição:

$$\sum_{i=1}^{NC} n_i a_{ji} = b_j, j = 1, \dots, NE \quad (3-11)$$

onde, NE é o número do elemento.

Também, para a implementação do código, foi necessário utilizar a percentagem mássica do componente utilizada na combustão, seja ele o *Diesel B12* ou a mistura *Diesel B12 + H<sub>2</sub>*. Tal percentagem mássica foi obtida de acordo com o seguinte equacionamento:

$$\%_i^E = \frac{E_i}{\sum E_i} = \frac{\dot{m}_i \cdot PCI_i^m}{\sum \dot{m}_i \cdot PCI_i^m} = \frac{\dot{m}_i / \dot{m}_t \cdot PCI_i^m}{\sum \dot{m}_i / \dot{m}_t \cdot PCI_i^m} = \frac{\%_i^m \cdot PCI_i^m}{\sum \%_i^m \cdot PCI_i^m} \quad (3-12)$$

onde,  $\dot{m}_i$  é a vazão mássica em kg/s,  $\%_i^m$  é a fração mássica da espécie i e  $PCI_i^m$  é o poder calorífico inferior da espécie i em MJ/kg

$$\%_i^E = \frac{E_i}{\sum E_i} = \frac{\dot{V}_i \cdot PCI_i^v}{\sum \dot{V}_i \cdot PCI_i^v} = \frac{\dot{V}_i / \dot{V}_t \cdot PCI_i^v}{\sum \dot{V}_i / \dot{V}_t \cdot PCI_i^v} = \frac{\%_i^v \cdot PCI_i^v}{\sum \%_i^v \cdot PCI_i^v} \quad (3-13)$$

onde,  $\dot{V}_i$  é a vazão volumétrica em  $m^3/s$ ,  $\%_i^v$  é a fração volumétrica da espécie i e  $PCI_i^v$  é o poder calorífico inferior da espécie i em  $MJ/m^3$  ou  $MJ/L$

A relação entre  $PCI_i^v$  e  $PCI_i^m$  é dada por:

$$PCI_i^v = PCI_i^m \cdot \rho_i \quad (3-14)$$

onde,  $\rho_i$  é a densidade da espécie i em  $kg/m^3$

A partir disso, foi desenvolvido uma modelagem que retornasse as percentagens mássicas da mistura a partir das taxas de substituição volumétrica (diesel e biodiesel) e energética ( $H_2$  no diesel-biodiesel), como se segue na Tabela 3.2. Percentagens mássicas essas que foram utilizadas no código MATLAB contido no Anexo 8.3.

Tabela 3.2 - Cálculo da percentagem mássica a partir da taxa de substituição volumétrica (diesel e biodiesel) e energética ( $H_2$  no diesel-biodiesel)

Substância	Componente característico	Fórmula	Densidade (kg/m³ a 15°C)	PCI (MJ/kg)	Percentagem mássica			Mistura binária		Mistura ternária		Percentagem mássica da		
					%C	%H	%O	%vol	%mass	%energy	%mass	%C	%H	%O
Diesel	Dodecano	C12H26	0,753	43,0	84,61%	15,39%	0,00%	88,00%	86,21%	87,85%	86,21%	83,63%	14,87%	1,50%
Biodiesel	Ester metílico de ácido linoleico	C19H34O2	0,883	37,2	77,50%	11,64%	10,87%	12,00%	13,79%	12,15%	13,79%			
Hidrogénio	Dihidrogénio	H2	-	120,0	0,00%	100,00%	0,00%			0,00%	0,00%			
Substância	Componente característico	Formula	Densidade (kg/m³ a 15°C)	PCI (MJ/kg)	Percentagem mássica			Mistura binária		Mistura ternária		Percentagem mássica da		
					%C	%H	%O	%vol	%mass	%energy	%mass	%C	%H	%O
Diesel	Dodecano	C12H26	0,753	43,0	84,61%	15,39%	0,00%	88,00%	86,21%	83,46%	84,65%	82,11%	16,42%	1,47%
Biodiesel	Ester metílico de ácido linoleico	C19H34O2	0,883	37,2	77,50%	11,64%	10,87%	12,00%	13,79%	11,54%	13,54%			
Hidrogénio	Dihidrogénio	H2	-	120,0	0,00%	100,00%	0,00%			5,00%	1,82%			
Substância	Componente característico	Formula	Densidade (kg/m³ a 15°C)	PCI (MJ/kg)	Percentagem mássica			Mistura binária		Mistura ternária		Percentagem mássica da		
					%C	%H	%O	%vol	%mass	%energy	%mass	%C	%H	%O
Diesel	Dodecano	C12H26	0,753	43,0	84,61%	15,39%	0,00%	88,00%	86,21%	74,67%	81,18%	78,75%	19,84%	1,41%
Biodiesel	Ester metílico de ácido linoleico	C19H34O2	0,883	37,2	77,50%	11,64%	10,87%	12,00%	13,79%	10,33%	12,98%			
Hidrogénio	Dihidrogénio	H2	-	120,0	0,00%	100,00%	0,00%			15,00%	5,84%			
Substância	Componente característico	Formula	Densidade (kg/m³ a 15°C)	PCI (MJ/kg)	Percentagem mássica			Mistura binária		Mistura ternária		Percentagem mássica da		
					%C	%H	%O	%vol	%mass	%energy	%mass	%C	%H	%O
Diesel	Dodecano	C12H26	0,753	43,0	84,61%	15,39%	0,00%	88,00%	86,21%	61,49%	74,92%	72,68%	26,02%	1,30%
Biodiesel	Ester metílico de ácido linoleico	C19H34O2	0,883	37,2	77,50%	11,64%	10,87%	12,00%	13,79%	8,51%	11,98%			
Hidrogénio	Dihidrogénio	H2	-	120,0	0,00%	100,00%	0,00%			30,00%	13,10%			

## 4. METODOLOGIA EXPERIMENTAL

### 4.1. Material

#### 4.1.1. Definição do veículo para os ensaios

Foi realizada uma pesquisa mais aprofundada na qual procurou-se detalhes técnicos específicos nos artigos usados na revisão bibliográfica. Com isso, foi escolhido o caminhão MB Accelo 815 4x2 à ser instalado em uma bancada dinamométrica nas dependências do Instituto de Mobilidade e Energias Sustentáveis (IMES), assim como foram definidas e implementadas as condições de realização dos ensaios. Esta unidade veicular, tem um motor com as especificações apresentadas na Tabela 4.1.1.1.

Tabela 4.1.1.1 - Especificações do motor CI à combustível Diesel [46]

Motor	
Modelo	MB OM 924 LA (Proconve P-7)
Cilindros e arranjo	4 cilindros, vertical em linha, <i>turbocooler</i>
Volume (L)	4,8
Sist. Pós-tratamento	Redução Catalítica Seletiva de $NO_x$ (SCR)
Potência máxima	153 kW (208 cv) à 2200 RPM
Torque máximo	780 N.m (79,5 mkgf) 1.200-1.600/min
Unidades injetoras	Individuais com injeção direta
Polia adicional AC	Sim

A realização dos ensaios fazendo adaptações simples no veículo não permite a instalação da instrumentação que normalmente é utilizada em bancadas de laboratório. Com isso, foi sugerido pela Mercedes-Benz do Brasil (MBB) a obtenção das informações coletadas pela Unidade de Controle Eletrônica (ECU) dos sensores instalados a bordo do veículo através do software proprietário e restrito MARC.

A Figura 4.1.1.1 e 4.1.1.2 apresenta a solução técnica, para realizar os ensaios no curto tempo estipulado para executar o projeto, realizando

simples adaptações no veículo comercial escolhido. Nesta figura, os componentes requeridos para realizar os ensaios são listados a seguir:

- Dinamômetro de chassi Horiba Vulcan EMS-CD48L 2WD;
- Analisador de gases de exaustão MEXA-ONE 7200/7500;
- Sistema de alimentação de hidrogênio;
- Ventilador axial de velocidade variável.

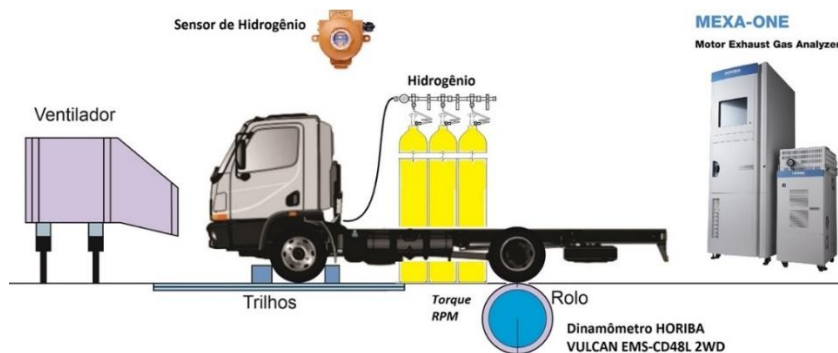


Figura 4.1.1.1 - Esquema experimental



Figura 4.1.1.2 - Imagens do veículo Mercedes-Benz Accelo 815 já instrumentado, que foi avaliado no dinamômetro de chassi

Foram feitas modificações no motor, como no cabeçote do motor que foi instalado o sensor de pressão AVL GU22CK dos gases da câmara de combustão. Outra adaptação que foi realizada no motor, foi a instalação de um conector customizado para obter o sinal do sensor de posição do eixo do motor que foi aquisitado pelo equipamento AVL Flex IFEM. Por fim, para avaliar a eficiência térmica indicada ITE, foi importante registrar

simultaneamente a pressão na câmara de combustão e a posição do eixo do virabrequim do motor.

#### 4.1.2. Combustíveis

Para realizar os ensaios, foram utilizados os combustíveis óleo diesel B S10 e hidrogênio Grau 3.0 (ou seja, pureza acima de 99,9%).

#### 4.1.3. Sistema de fornecimento de hidrogênio

Os componentes do sistema de fornecimento de hidrogênio atendem as normas CGA G-5.4 e serão inspecionadas por especialistas em instalações de gases especiais. A Figura 4.1.3.1 e 4.1.3.2, mostra esquematicamente os componentes do sistema de fornecimento de hidrogênio no motor do caminhão Accelo 815 e o skid do sistema de fornecimento de hidrogênio, respectivamente.

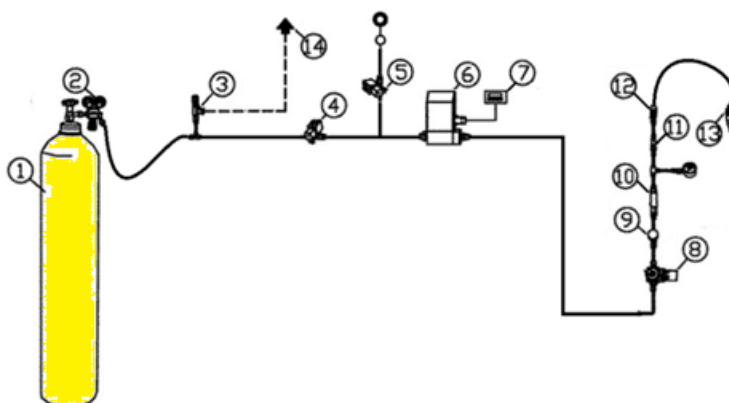


Figura 4.1.3.1 - Componentes do sistema de fornecimento de hidrogênio. Adaptado de [35].



Figura 4.1.3.2 - Skid do sistema de fornecimento de hidrogênio.

Os componentes do sistema são listados a seguir:

1. Cilindro de hidrogênio comprimido;
2. Válvula reguladora de pressão;
3. Válvula de alívio de pressão;
4. Válvula solenóide para parada de emergência;
5. Válvula solenóide para evacuação de hidrogênio em parada normal;
6. Controlador de vazão mássica de hidrogênio;
7. Conexão com o sistema de controle e medição;
8. Válvula reguladora de baixa pressão;
9. Válvula de fechamento manual;
10. Válvula de retenção (*check valve*);
11. Válvula corta chama (*flame arrester*);
12. Conector rápido;
13. Conector no coletor de admissão;
14. Linha de descarga de hidrogênio.

O hidrogênio é fornecido por um cilindro de armazenamento de gases em elevada pressão (200 bar quando cheio). Esta pressão é reduzida a 6 bar por uma válvula reguladora de pressão. Muitos dos demais componentes do sistema têm a função de garantir a segurança dos ensaios. Em caso de emergência, um botão físico de parada de emergência foi projetado para iniciar os procedimentos de fechamento de válvulas e intensificar a ação do extrator de ar do laboratório e, por fim, o hidrogênio será despressurizado das linhas por uma tubulação de extração do gás. Os componentes do sistema foram instalados em um skid com rodas, o qual será deslocado para o abrigo de cilindros de gases após finalizar os ensaios. No sistema, foi instalado um controlador de vazão Alicat MCR-500SLPM, que tem como função regular a quantidade de hidrogênio de forma a atingir a fração de substituição de energia requerida no ensaio.

Os últimos componentes da listagem, também vão garantir a segurança no laboratório evitando o retorno de chama. Estes componentes são as válvulas de retenção e corta chamas. Uma medida adicional de

segurança foi dada pela instalação de uma válvula de alívio de pressão que atuará no caso da pressão do hidrogênio na linha de alimentação ultrapassar 10 bar. Neste cenário, o hidrogênio será evacuado para fora das instalações do IMES.

Uma pesquisa foi conduzida sobre a ocorrência de backfire, um fenômeno indesejado de combustão que pode ocorrer no coletor de ar de admissão e no escapamento do motor. Em motores com injeção direta de hidrogênio, o backfire não é induzido, mas em sistemas carburados "fumigados" e de injeção de combustível no coletor, pode ocorrer em circunstâncias específicas. Segundo Gao et al. [40], motores de ignição por compressão bi-combustível também têm a possibilidade de backfire. No entanto, a ocorrência é quase impossível devido às relações de equivalência ar-hidrogênio reduzidas e às temperaturas residuais mais baixas nos cilindros. Embora a probabilidade de backfire seja baixa, foram instaladas válvulas corta-chama e anti-retorno nas linhas de alimentação para segurança e proteção da instalação.

As especificações da válvula de alívio que foi utilizada na instalação é a seguinte: 4A-RL4A-VT-SS. Esta válvula do fabricante Parker, apresenta conexões de compressão de dupla anilha de 1/4" e construída em aço inoxidável com *o'rings* de vedação de borracha fluorcarbonada ou comumente conhecida como Viton. Este componente é vital para garantir a segurança da instalação, uma vez que, em caso de se apresentar uma sobrepressão de hidrogênio na linha de entrada do controlador de vazão, a válvula deriva o excesso de hidrogênio à tubulação de dreno ou ventilação.

Algumas das características de operação do controlador de vazão Alicat MCR500 são:

- Vazão nominal: 500 SLPM;
- Exatidão:  $\pm(0,8\%$  da leitura + 0,2% do fundo de escala);
- Exatidão calibrado:  $\pm(0,4\%$  da leitura + 0,2% do fundo de escala);
- Repetibilidade:  $\pm 0,2$  fundo de escala;
- Tempo de resposta típico: 100 ms (ajustável);



- Tipo de válvula: Normalmente fechada;
- Opções de comunicação: RS-232, RS-485, MODBUS RTU;
- Sinal analógico de entrada/saída: 0-10 V cc;
- Voltagem de alimentação: 24 a 30 V cc.

Este importante componente da instalação de hidrogênio funciona juntamente com o software de comando e controle FlowVision 2.0TM da Alicat [41]. Este software possui uma interface gráfica que permite controlar manualmente a vazão de hidrogênio.

#### **4.1.4. Medição da vazão de combustível Diesel**

Essa importante grandeza usada na avaliação dos parâmetros de desempenho do motor foi obtida por meio do software MARC. Para isso, a dosagem de hidrogênio para alcançar a fração de substituição de energia HES foi ajustada continuamente, pois depende da vazão de diesel, que muda dinamicamente conforme o operador ajusta os pedais do acelerador para obter um torque específico. A equipe de eletrônica do IMES utilizou hardware e software de controle automatizado para ajustar dinamicamente a vazão de hidrogênio, predefinindo um valor de HES e monitorando a vazão de combustível diesel.

### **4.2. Métodos**

Para efeitos de comparação do desempenho e emissões do motor alimentado com hidrogênio, foi preciso levantar os mapas dessas grandezas nas condições originais para as quais foi desenvolvido o motor. Isto é, operando com combustível Diesel puro sem alterações nos sistemas de alimentação de combustível e ar. No Anexo 8.1, são apresentados os dados das condições de operação nominal do motor MB OM 924 LA do caminhão Accelo 815, tais como velocidade rotacional, torque, potência e consumo específico. A Tabela 4.2.1, resume as condições de operação nominal ou de plena carga do motor. No modo bicomcombustível diesel-hidrogênio, estes valores definiram as janelas de operação para realizar os ensaios.

Tabela 4.2.1 - Parâmetros nominais em plena carga do motor MB OM 924 LA do veículo Accelo 815.

RPM	BSFC [g/kWh]	Torque [Nm]	BP [kW]
800	217	485	40,6
1000	203	550	57,6
1200	196	580	72,9
1400	194	582.5	85,4
1600	195	585	98,0
1800	199	575	108,4
2200	210	498	114,7
2400	223	426	107,1
2600	255	298	81,1

Na Tabela 4.2.1 acima, os valores de torque para cada velocidade rotacional do motor são resultados de uma operação à 100% de carga. Na Figura 4.5 a seguir, é apresentada a janela ou mapa de operação do motor MB OM 924 LA, na qual, a linha superior representa o torque máximo apresentado na folha de especificações do motor.

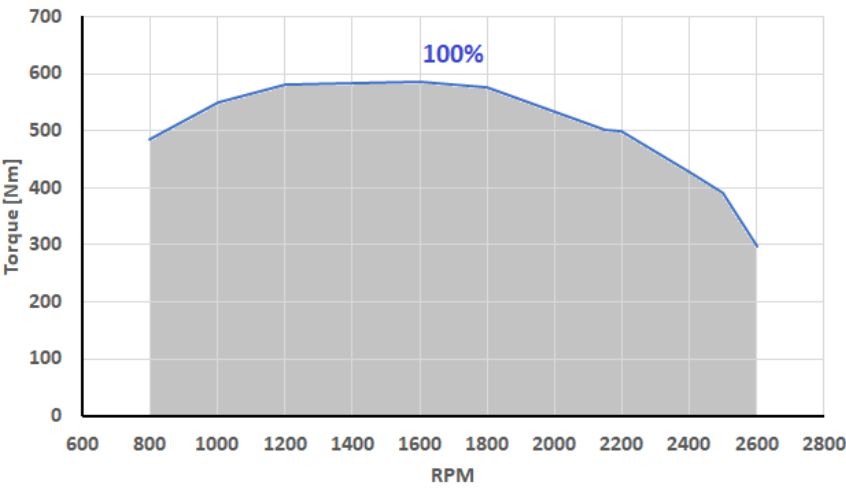


Figura 4.2.1 - Janela de operação do motor MB OM 924 LA

Desta forma, para realizar os ensaios foram definidas as seguintes condições de operação em regime estacionário

- Velocidade rotacional do motor: 1000, 1600 e 2200 RPM;
- Torque do motor: medido entre *idle* e plena carga

A condição dos ensaios com  $HES = 0\%$  foi necessária para avaliar os efeitos da adição de hidrogênio no sistema de alimentação de combustível do motor nos parâmetros de desempenho e índices de emissões. Como os ensaios foram realizados em um dinamômetro de chassi, os valores de velocidade rotacional e torque do motor foram estimados baseados nos dados registrados no rolo do dinamômetro.

A definição das condições dos ensaios tiveram como objetivo final o levantamento de dados para avaliar quantitativamente, a variação dos parâmetros de desempenho e emissões com a injeção de hidrogênio no motor. Para isso, os dados coletados permitiram obter um modelo matemático polinomial de ordem 2 com termos retangulares. O cálculo dos coeficientes do modelo em conjunto com uma análise estatística da sua robustez do tipo t de Student e/ou ANOVA, também permitiram interpolar o comportamento em condições não testadas do domínio experimental, identificar o impacto de cada variável nos parâmetros analisados e, por fim, identificar as condições de uso otimizado. Com os dados obtidos, foram analisados os seguintes indicadores de emissão:

- Fração molar [ppm] de  $H_2$  em função da temperatura [K] e da razão ar/combustível  $[\lambda]$ ;
- Fração molar [ppm] de  $CO$  em função da temperatura [K] e da razão ar/combustível  $[\lambda]$ ;
- Fração molar [ppm] de  $CO_2$  em função da temperatura [K] e da razão ar/combustível  $[\lambda]$ ;
- Fração molar [ppm] de  $H_2O$  em função da temperatura [K] e da razão ar/combustível  $[\lambda]$ ;
- Fração molar [ppm] de  $NO$  em função da temperatura [K] e da razão ar/combustível  $[\lambda]$ .

## 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

### 5.1. Validação do código

O código escrito foi uma adaptação daquele desenvolvido por Pinho [43] que, por sua vez, comparou os seus resultados com aqueles produzidos por Sun [44] o contexto do processo de reforma de etanol. Logo, para a validação do modelo matemático aplicado à pesquisa que coordena esse estudo, foi feita uma comparação entre os resultados encontrados por Pinho [43] na Reforma Auto Termal do Etanol e aqueles encontrados na Combustão Incompleta do Etanol, representados na Figura 5.1.1.

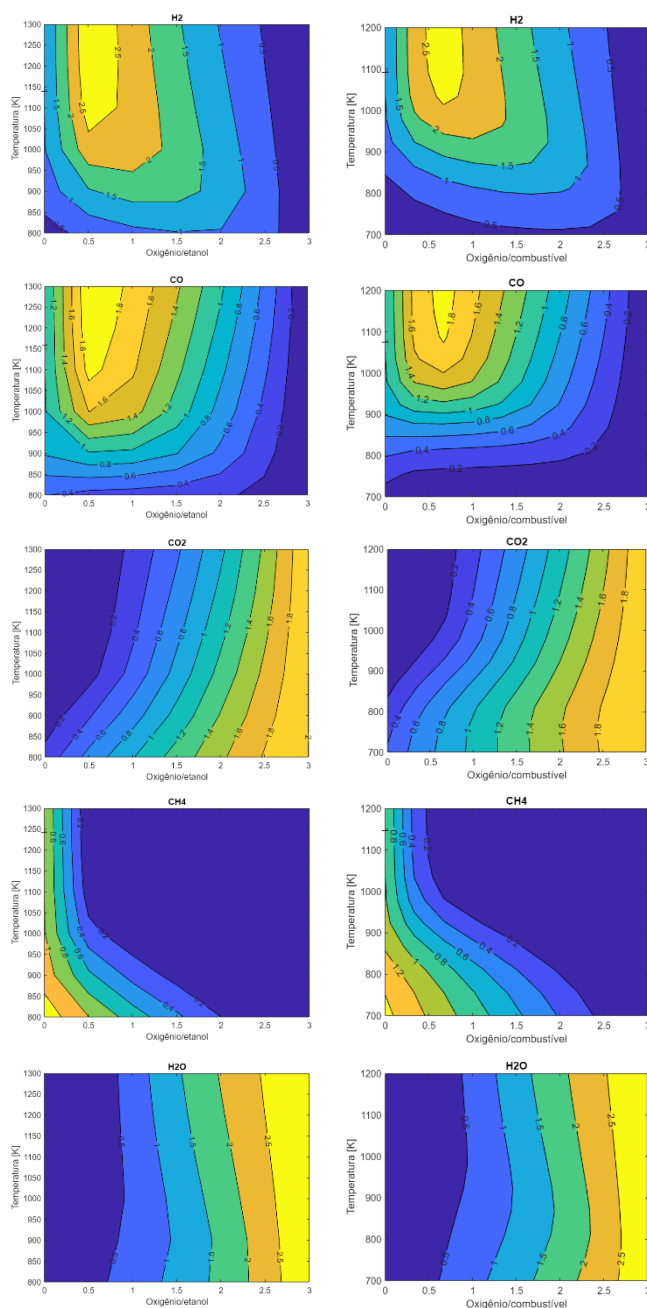


Figura 5.1.1 - À esquerda o resultado do efeito da temperatura e umidade na produção de  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$  pela Reforma Auto Termal do Etanol [43] e à direita o resultado do efeito da temperatura e umidade na produção  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$  pela combustão incompleta do Etanol

Tendo em vista a enorme semelhança dos dados e plotagens geradas com aqueles apresentados por Pinho [43], concluiu-se que o código é válido para o propósito do presente estudo.

## 5.2. Resultados teóricos

De acordo com a modelagem teórica realizada na seção 3, foram realizadas simulações da combustão de diversas misturas de *Diesel* +  $H_2$ . No que diz respeito as emissões, foco do presente estudo, os resultados encontram-se abaixo.

### 5.2.1. Perfil da combustão em relação a $CO_2$ , $O_2$ , $H_2O$ e $N_2$

Os resultados obtidos encontram-se nos gráficos abaixo.

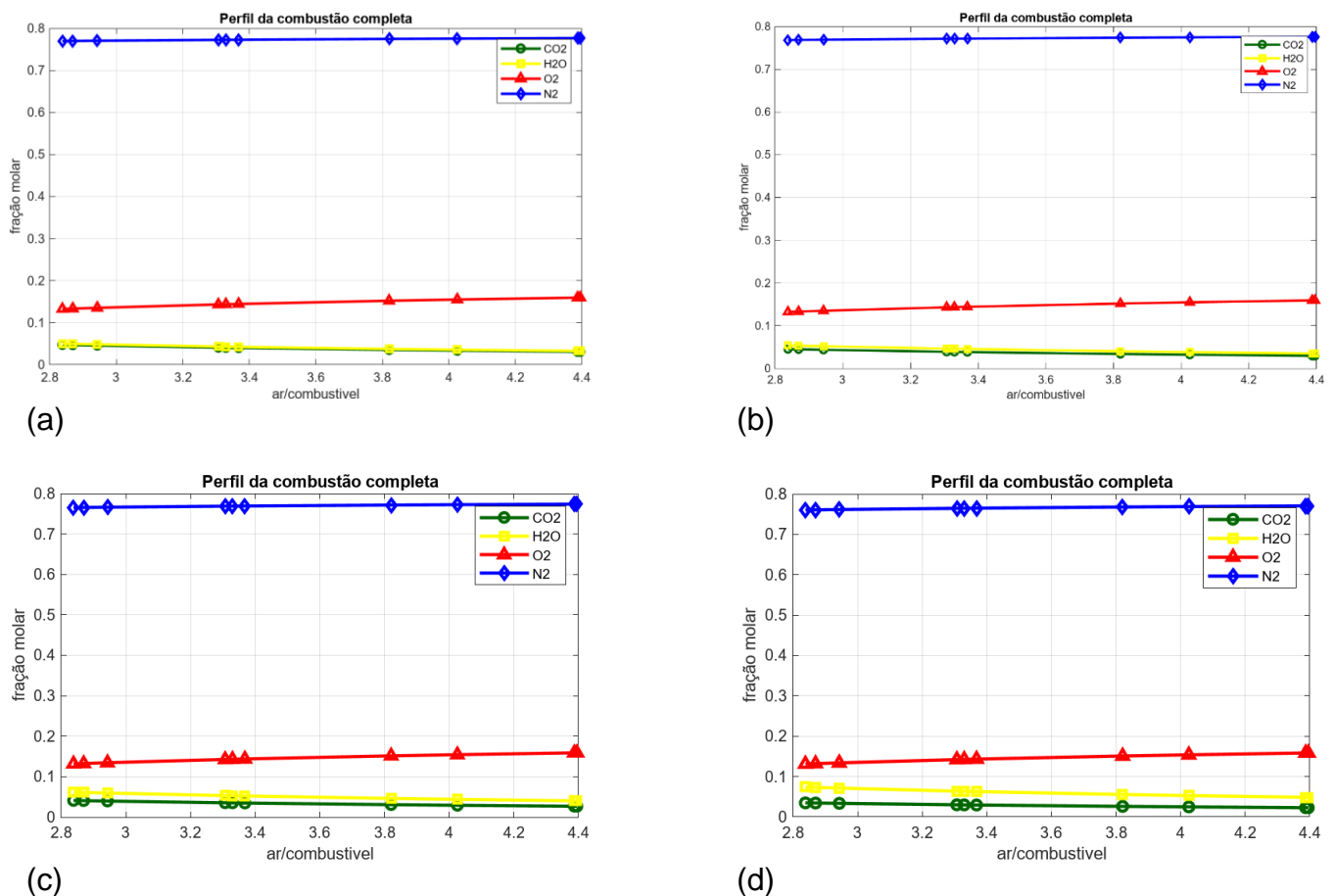


Figura 5.2.1.1 - Perfil da combustão completa das frações molares das misturas B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12+HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d) em função da razão ar/combustível

Na Figura 5.2.1.1, observa-se que a fração molar de  $N_2$  manteve-se quase que constante com o aumento da razão ar/combustível, diferindo

apenas na fração molar inicial que cai à medida em que se substitui o Diesel B12 pelo  $H_2$ , o que faz sentido pois com o aumento dessa razão temos que sobra comburente em relação ao combustível e, como o  $N_2$  está presente no ar, sua fração molar aumenta.

No caso do  $O_2$ , observa-se em todas as misturas testadas que, a sua fração molar apresenta um leve comportamento crescente, à medida que a razão ar/combustível aumenta, o que faz sentido pelo mesmo motivo observado em  $N_2$ .

Já no caso do  $CO_2$ , observa-se em todas as misturas testadas que, a sua fração molar apresenta um leve comportamento decrescente, com o aumento da razão ar/combustível, diferindo apenas na fração molar inicial que cai à medida em que se substitui o Diesel B12 pelo  $H_2$ , o que faz sentido pois esse é composto advém do combustível que, nesse caso, tem sua participação diminuída com o aumento do HES.

Por fim, no caso da água  $H_2O$ , observa-se em todas as misturas testadas que, a sua fração molar apresenta comportamento decrescente, com o aumento da razão ar/combustível, diferindo apenas na fração molar inicial que aumenta à medida em que se substitui o Diesel B12 pelo  $H_2$ , o que faz sentido pois esse é o composto formado a partir da combustão do  $H_2$ . Sua fração molar cai pois, com o aumento da razão ar/combustível tem-se menos combustível para queimar e, portanto menos produto. Já a sua fração molar inicial aumenta pois, com o aumento do HES tem-se também o aumento do produto da combustão do  $H_2$ .

### 5.2.2. Emissões de Hidrogênio $H_2$

Os resultados obtidos encontram-se nos gráficos abaixo.

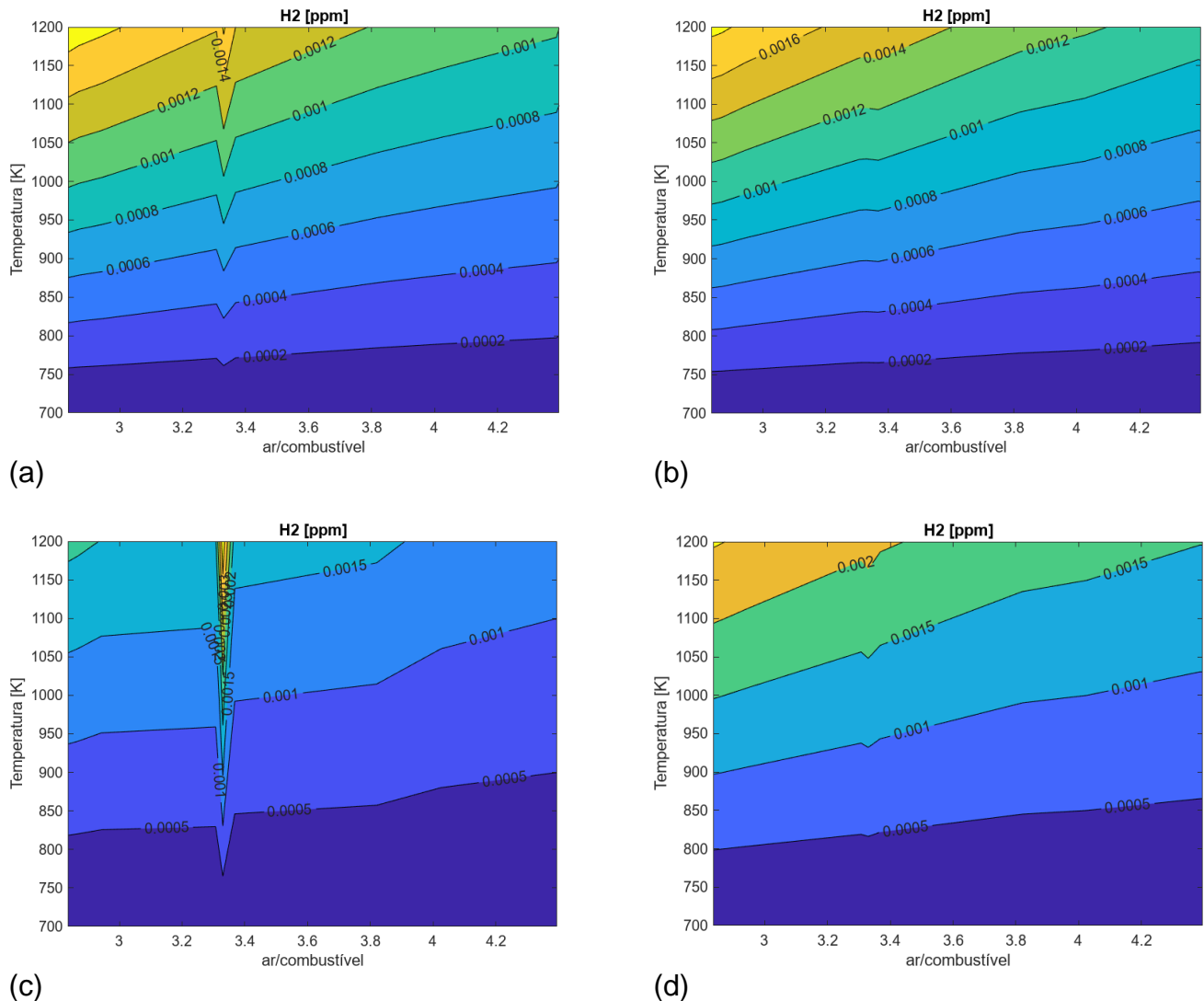
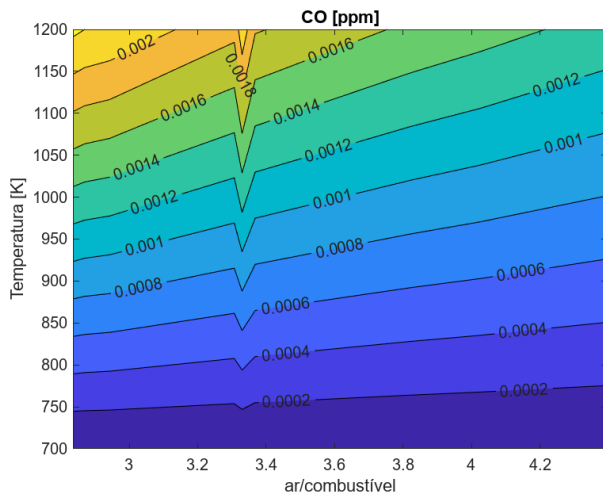


Figura 5.2.2.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de  $H_2$  pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)

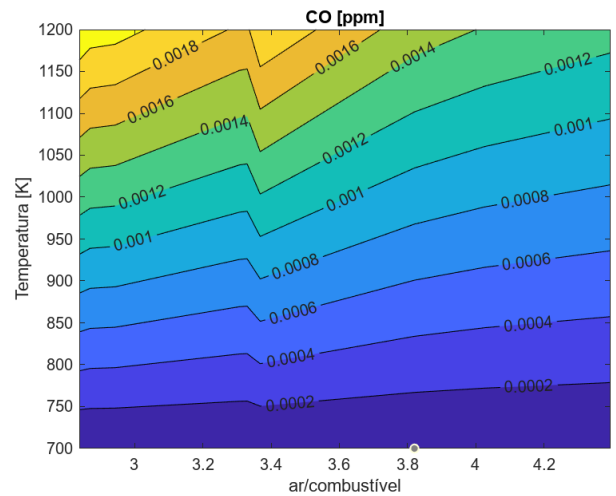
A Figura 5.2.2.1 revela que a concentração de  $H_2$  foi muito baixa, com valores da ordem de  $10^{-3}$ , revelando que o aumento do HES não gerou impacto nas emissões. Esse padrão faz sentido pois, além desse composto ser um dos combustíveis da queima em questão, a razão ar/combustível é maior que 1, ou seja, há mais comburente do que a quantidade necessária para queimar todo combustível e, por isso, pode-se afirmar que o fenômeno analisado se assemelha muito a uma combustão completa.

### 5.2.3. Emissões de Monóxido de Carbono $CO$

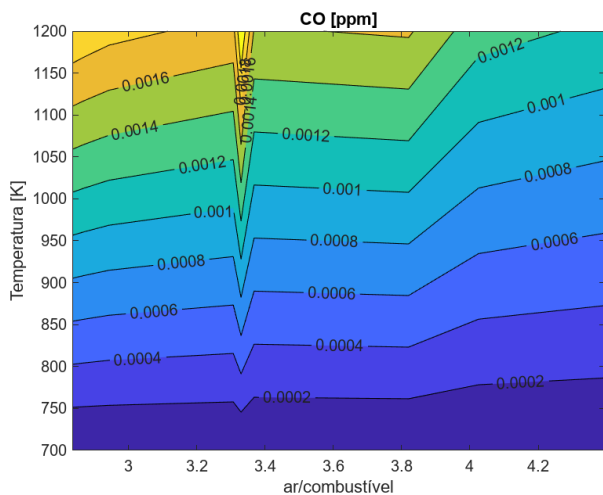
Os resultados obtidos encontram-se nos gráficos abaixo.



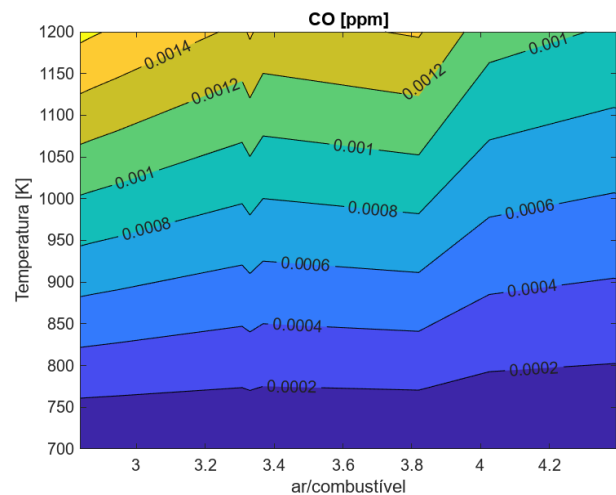
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.2.3.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de  $CO$  pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)

Ao analisar a Figura 5.2.3.1, revela-se que a concentração de  $CO$  permanece muito baixa, na ordem de  $10^{-3}$ , e com uma leve tendência de queda à medida que HES aumenta, em todas as faixas de substituição. Essas ocorrências foram predominantemente associadas a regimes de altas temperaturas. Esse resultado corrobora com o padrão encontrado na maioria dos estudos da literatura, onde a concentração de  $CO$  geralmente segue uma trajetória decrescente.



### 5.2.4. Emissões de Dióxido de Carbono $CO_2$

Os resultados obtidos encontram-se no gráficos abaixo.

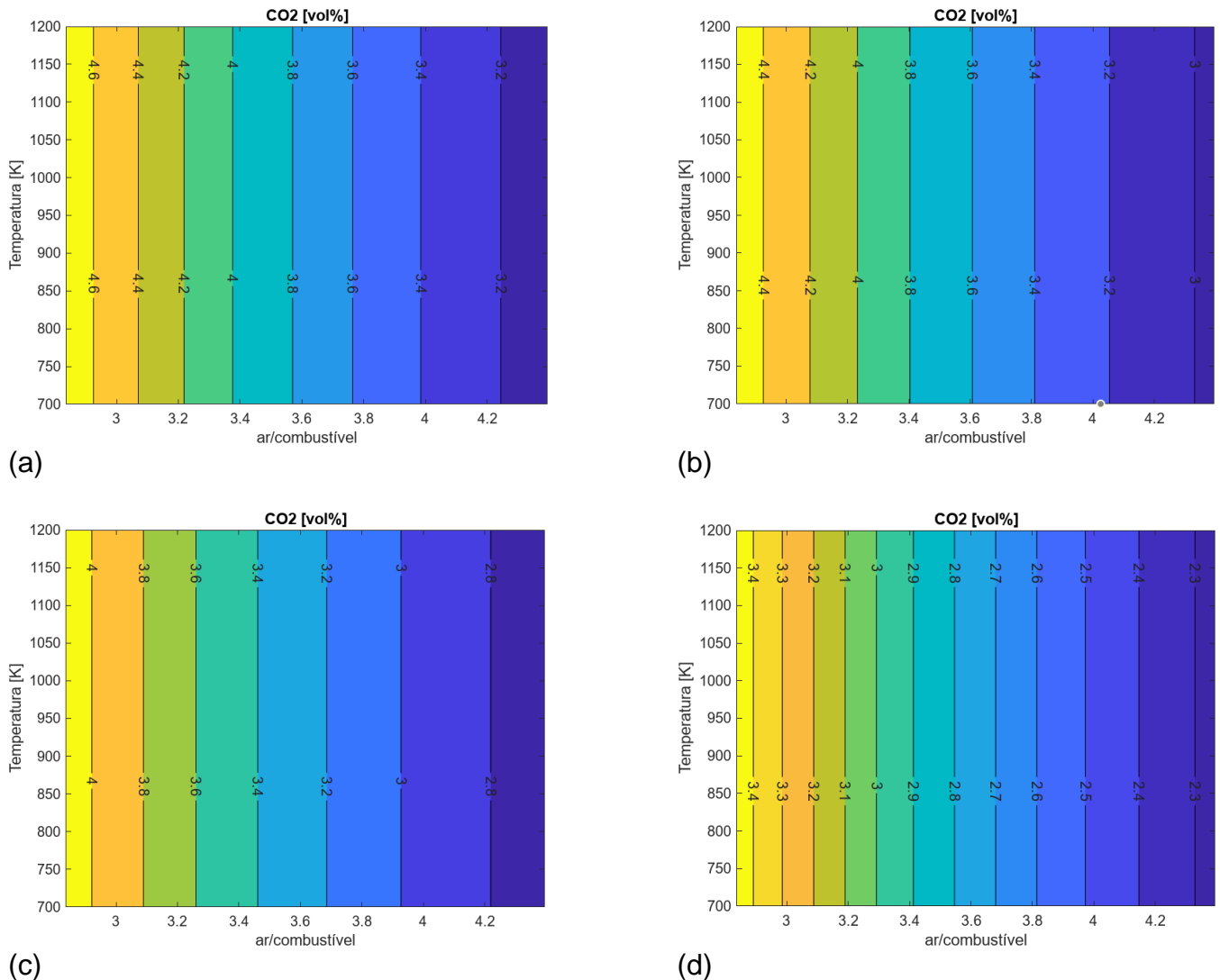


Figura 5.2.4.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de  $CO_2$  pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)

Ao analisar a Figura 5.2.4.1, observa-se que a concentração de  $CO_2$  exibe uma tendência decrescente, de cerca de 15%, à medida que a participação de  $H_2$  na mistura aumentou. Com o aumento da razão ar/combustível, observa-se que a concentração de  $CO_2$  apresenta uma trajetória de queda, de cerca de 5%, o que é explicado pelo fato desse componente ser majoritariamente proveniente do combustível, que diminui a sua participação na combustão quando a razão aumenta. Esse achado está alinhado com a maioria dos estudos encontrados na literatura

consultada, os quais consistentemente reportaram uma diminuição na concentração de  $CO_2$  com o aumento dos valores de HES.

### 5.2.5. Emissões de Água $H_2O$

Os resultados obtidos encontram-se nos gráficos abaixo.

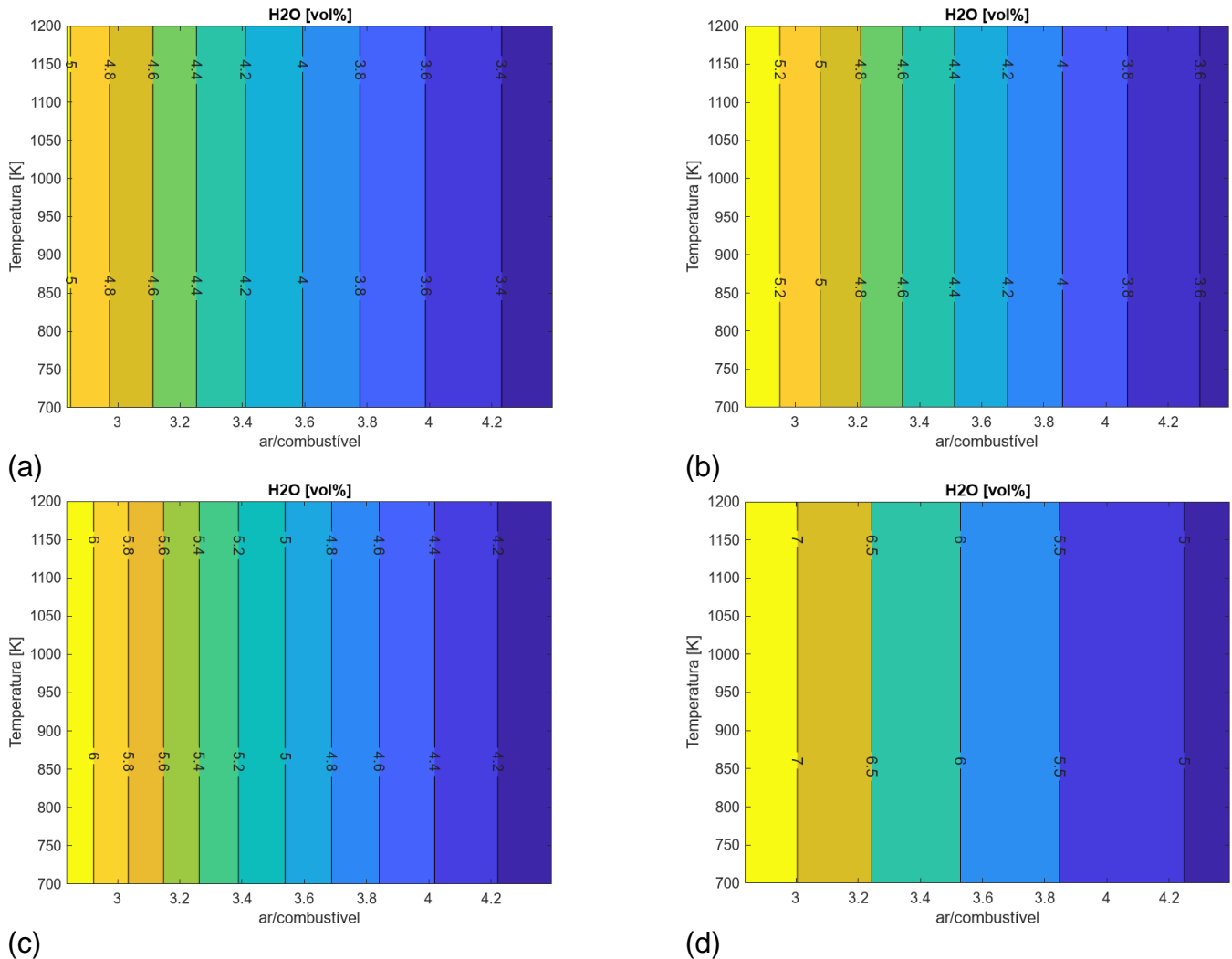
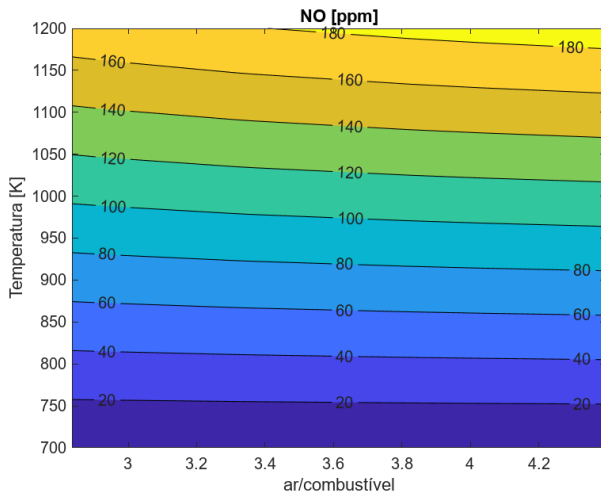


Figura 5.2.5.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de  $H_2O$  pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)

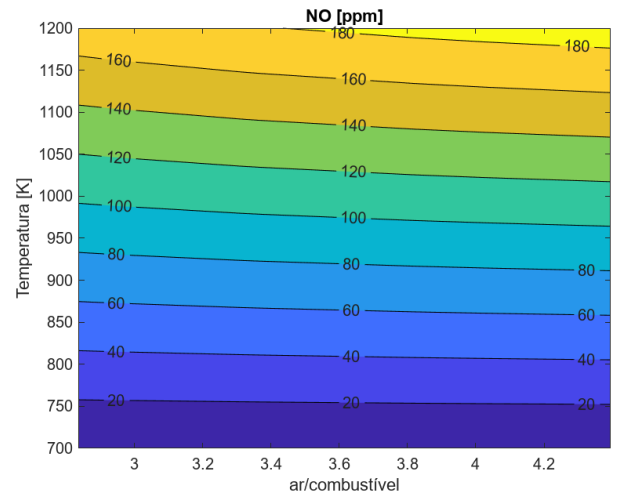
Ao examinar a Figura 5.2.5.1, observa-se um aumento, de cerca de 16%, na concentração de  $H_2O$  à medida que o HES aumentou. Além disso, com o aumento da razão ar/combustível, observa-se que a concentração de  $H_2O$  apresenta uma trajetória de queda, de cerca de 7%, o que é explicado pelo fato desse componente ser majoritariamente proveniente do combustível, que diminui a sua participação na combustão quando a razão aumenta. Além disso, a água  $H_2O$  é um dos produtos gerados durante a combustão do hidrogênio  $H_2$ .

### 5.2.6. Emissões de Monóxido de Nitrogênio $NO$

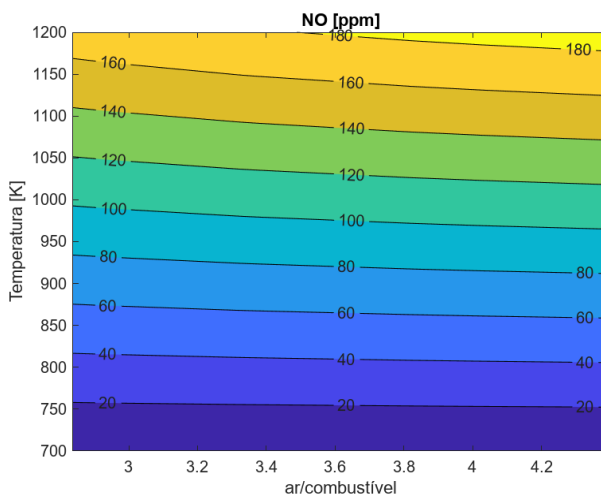
Os resultados obtidos encontram-se nos gráficos abaixo.



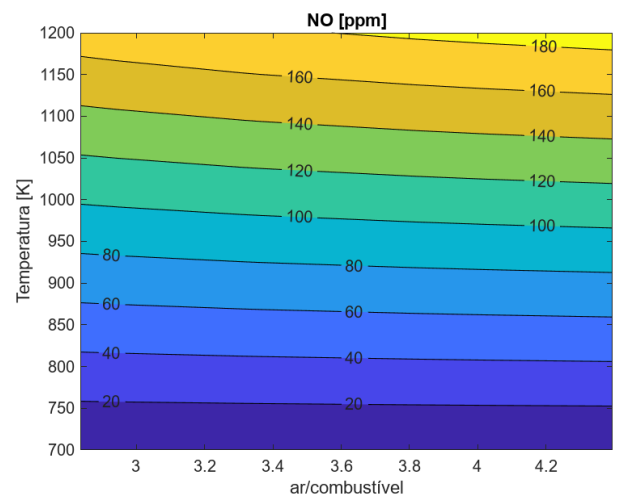
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 5.2.6.1 - Resultado do efeito da temperatura e razão ar/combustível na produção de  $NO$  pela combustão incompleta das misturas de B12 + HES=0% (a), B12 + HES=5% (b), B12 + HES=15% (c) e B12 + HES=30% (d)

Na Figura 5.2.6.1, não foi observado uma variação considerável da concentração de  $NO$  à medida que o HES e a razão ar/combustível aumentaram. Esse resultado se contrapõe a tendência observada nos trabalhos de revisão da literatura.

### 5.3. Resultados experimentais

De acordo com os parâmetros definidos na seção 4, foram realizados testes experimentais com o combustível Diesel B12. No que diz respeito as emissões, foco do presente estudo, os resultados encontram-se abaixo.

### 5.3.1. Emissões de Monóxido de Carbono $CO$

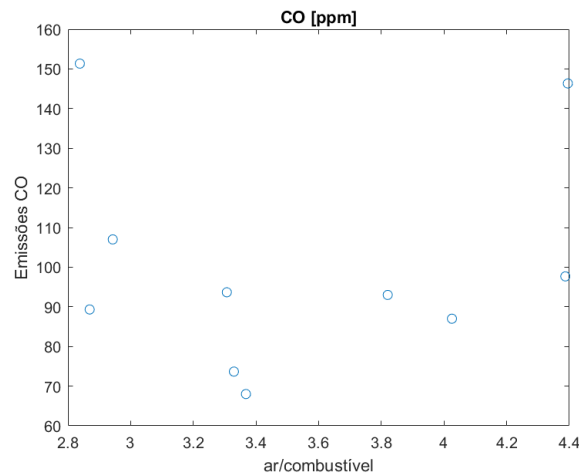


Figura 5.3.1.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de  $CO$  provenientes de combustão de Diesel B12

Na Figura 5.3.1.1, foi observado que  $CO$  assumiu menores valores de concentração à medida que a razão ar/combustível aumenta. Esse resultado corrobora com o padrão encontrado na maioria dos estudos da literatura, onde a concentração de  $CO$  geralmente segue uma trajetória decrescente.

### 5.3.2. Emissões de Monóxido de Carbono $CO_2$

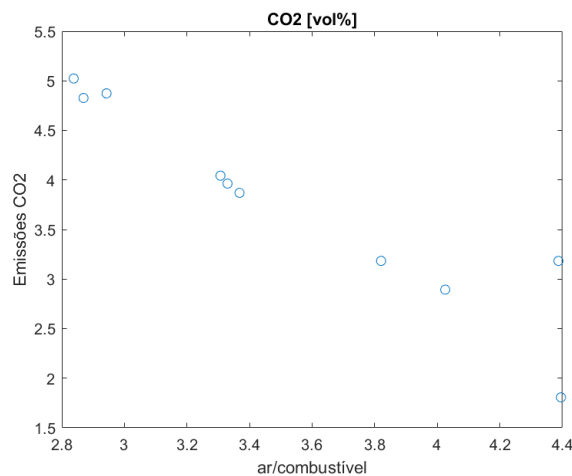


Figura 5.3.2.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de  $CO_2$  provenientes de combustão de Diesel B12

Na Figura 5.3.1.2, observa-se uma tendência clara de queda na concentração de  $CO_2$  à medida que a razão ar/combustível aumenta. Esse resultado se justifica pelo fato desse componente ser majoritariamente proveniente do combustível, que diminui a sua participação na combustão quando a razão aumenta, corroborando inclusive com o modelo teórico desenvolvido cujo resultado é apresentado na Figura 5.2.4.1 (a).

### 5.3.3. Emissões de Monóxido de Carbono $O_2$

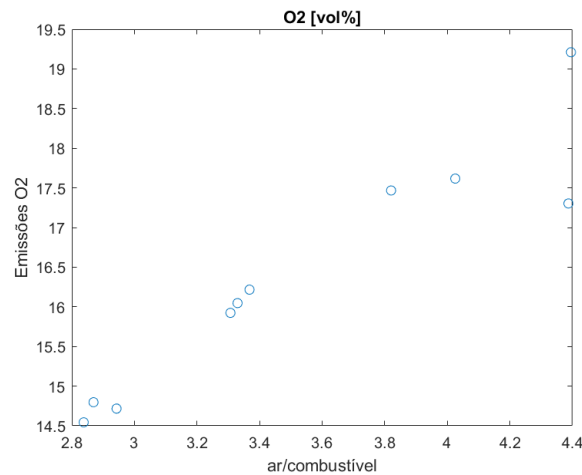


Figura 5.3.3.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de  $O_2$  provenientes de combustão de Diesel B12

Na Figura 5.3.3.1, observa-se uma tendência clara de alta na concentração de  $O_2$  à medida que a razão ar/combustível aumenta. Isso se justifica pois, como a razão ar/combustível é maior do que 1, o  $O_2$  encontra-se em excesso na reação de combustão.

### 5.3.4. Emissões de Monóxido de Carbono $NO_x$

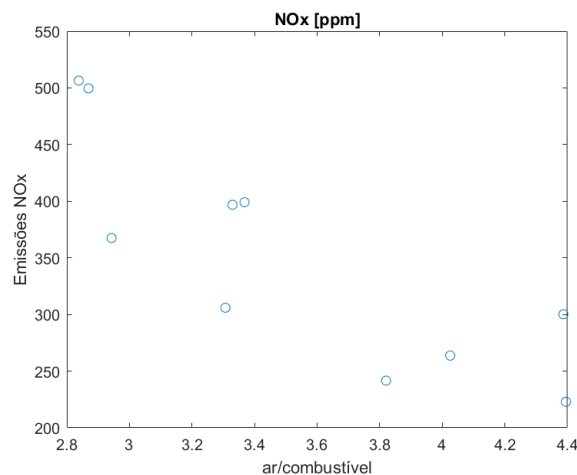


Figura 5.3.4.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de  $NO_x$  provenientes de combustão de Diesel B12

Na Figura 5.3.4.1, observa-se uma tendência clara de queda na concentração de  $NO_x$  à medida que a razão ar/combustível aumenta. Esse resultado se contrapõe aquele encontrado no modelo teórico apresentado na Figura 5.2.6.1 (a).

### 5.3.5. Emissões de Monóxido de Carbono $CH_4$

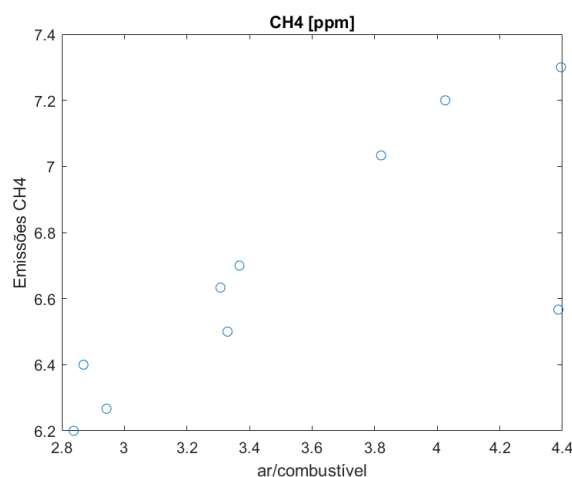


Figura 5.3.5.1 - Resultado do efeito da razão ar/combustível nas emissões de  $CH_4$  provenientes de combustão de Diesel B12

Na Figura 5.3.5.1, observa-se uma tendência clara de alta na concentração de  $CH_4$  à medida que a razão ar/combustível aumenta.

## 6. CONCLUSÕES

Em síntese, este estudo proporcionou uma análise aprofundada da literatura sobre o impacto da substituição de óleo diesel por hidrogênio no perfil de emissão em um veículo pesado, explorando as diversas faixas de substituição de  $H_2$  de modo a deslocar o diesel rumo à descarbonização. Sobre as emissões de  $CO$  e  $CO_2$ , a quase totalidade dos trabalhos que avaliaram estes compostos nos gases de exaustão do motor, indica a redução destes poluentes emitidos na atmosfera. Os trabalhos que apresentam resultados adversos, realizaram os ensaios em condições extremas de operação. Já sobre as emissões de  $NO_x$ , há indicações que este parâmetro de avaliação aumenta.

Esses resultados advindos da revisão da literatura validam aqueles encontrados pelo modelo matemático de Minimização da Energia Livre de Gibbs, os quais foram discutidos no Capítulo 5. E, além disso, comprovam a necessidade de ajustar o teor de  $H_2$  empregado em função das condições de operações de maneira a obter um perfil de emissões mais “limpo”.

Por fim, é crucial ressaltar que, embora tenha sido alcançado o objetivo principal do estudo que é avaliar o impacto da substituição de óleo diesel por hidrogênio no perfil de emissão em um veículo pesado, ainda há espaço para expansão e aprofundamento, como por exemplo, o refino do código de modelagem da simulação de combustão utilizado, a implementação de frações de  $H_2$  ainda mais ousadas e também a utilização de diferentes tipos de “blend”, visando ganhos ainda maiores de redução emissões de poluentes. Os resultados aqui apresentados contribuem significativamente para a temática da Transição Energética, fornecendo insights valiosos para estudos futuros.

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] CLIMA, Observatório do. **ANÁLISE DAS EMISSÕES DE E SUAS IMPLICAÇÕES PARA AS METAS CLIMÁTICAS DO BRASIL 1970-2021**. Disponível em: <https://energiaeambiente.org.br/wp-content/uploads/2023/04/SEEG-10-anos-v5.pdf>. Acesso em: 20 out. 2023.
- [2] IEA (2023), **Global Hydrogen Review 2023**, IEA, Paris <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2023>, License: CC BY 4.0
- [3] EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA (EPE). **Nota Técnica Hidrogênio Cinza: Produção a partir da reforma a vapor do gás natural**. Acesso em: maio 2022.
- [4] CONFEDERAÇÃO NACIONAL DA INDÚSTRIA (CNI). **Hidrogênio Sus- tentável Perspectivas e Potencial para a Indústria Brasileira**. Acesso em: outubro 2022.
- [5] SANTOS, F. M. S. M. D.; SANTOS, F. A. C. M. D. **O Combustível "Hidrogênio"**. Millennium on. Line, v. 31, p. 252-270, 2005. Disponível em: <[www.ipv.pt/millennium](http://www.ipv.pt/millennium)>.
- [6] LEITE, Hugo Filippo Ramalho. **Análise comparativa entre os desafios e perspectivas da utilização de hidrogênio em célula a combustível e em motores de combustão interna**. 2019. 20 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2020.
- [7] YAN, Fuwu; XU, Lei; WANG, Yu. **Application of hydrogen enriched natural gas in spark ignition IC engines: from fundamental fuel properties to engine performances and emissions**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2017. Volume 82, p. 1457-1488
- [8] SANDALCI T.; KARAGÖZ Y. **Experimental investigation of the combustion characteristics, emissions and performance of hydrogen port fuel injection in a diesel engine**. International Journal of Green Energy, 2014. Volume 39, p. 18480–9.
- [9] TEOH, Y. H.; HOW, H. G.; LE, T. D.; NGUYEN, H. T.; LOO, D. L.; RASHID, T. ; SHER, F.. **A review on production and implementation of hydrogen as a green fuel in internal combustion engines**. Fuel, 333:126525, 2023.
- [10] FRANTZIS, C.; ZANNIS, T.; SAVVA, P. G. ; YFANTIS, E. A.. **A review on experimental studies investigating the effect of hydrogen supplementation in ci diesel engines-the case of HYMAR**. Energies, 15(15), AUG 2022.
- [11] RAJORA, M.; SHARMA, D.; SINGH, D.; SHARMA, S.; SHARMA, P. K.; JHALANI, A. ; MISHRA, I.. **A review on production processes, performance and emissions analysis of hydrogen as a fuel in i.c. engines**. International Journal of Environment and Sustainable Development, 21(1-2):76–96, 2022.
- [12] THIYAGARAJAN, S.; VARUVEL, E.; KARTHICKEYAN, V.; SONTALIA, A.; KUMAR, G.; SARAVANAN, C.; DHINESH, B. ; PUGAZHENDHI, A.. **Effect of hydrogen on compression-ignition (ci) engine fueled with vegetable oil/biodiesel from various feedstocks: A review**. International Journal of Hydrogen Energy, 47(88):37648–37667, 2022. Hydrogen Energy Technology for Future.



- [13] YAN, F.; XU, L. ; WANG, Y.. **Application of hydrogen enriched natural gas in spark ignition ic engines: from fundamental fuel properties to engine performances and emissions**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 82:1457–1488, 2018.
- [14] HEYWOOD, J. B.. **Internal combustion engine fundamentals** / John B. Heywood. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, New York, 1988.
- [15] TSUJIMURA, T.; SUZUKI, Y.. **The utilization of hydrogen in hydrogen/diesel dual fuel engine**. International Journal of Hydrogen Energy, 42(19):14019–14029, 2017. Special Issue on The 21st World Hydrogen Energy Conference (WHEC 2016), 13-16 June 2016, Zaragoza, Spain.
- [16] DIMITRIOU, P.; KUMAR, M.; TSUJIMURA, T. ; SUZUKI, Y.. **Combustion and emission characteristics of a hydrogen-diesel dual-fuel engine**. International Journal of Hydrogen Energy, 43(29):13605–13617, 2018.
- [17] ZHOU, J.; CHEUNG, C. ; LEUNG, C.. **Combustion, performance and emissions of ULSD, PME and B50 fueled multi-cylinder diesel engine with naturally aspirated hydrogen**. International Journal of Hydrogen Energy, 38(34):14837–14848, 2013.
- [18] TALIBI, M.; HELLIER, P.; BALACHANDRAN, R. ; LADOMMATOS, N.. **Effect of hydrogen-diesel fuel co-combustion on exhaust emissions with verification using an in-cylinder gas sampling technique**. International Journal of Hydrogen Energy, 39(27):15088–15102, 2014.
- [19] BOSE, P. K.; MITRA, S.; BANERJEE, R.; MAJI, D. ; BARDHAN, P.. **Hydrogen fuelled agricultural diesel engine with electronically trolled timed manifold induction: an experimental approach**. In: Brebbia, C.; Mammoli, A., editors, ENERGY AND SUSTAINABILITY II, volumen 121 de WIT Transactions on Ecology and the Environment, p. 103+, ASHURST LODGE, SOUTHAMPTON SO40 7AA, ASHURST, ENGLAND, 2009. Wessex Inst Technol; Univ New Mexico; WIT Transact Ecol & Environm, WIT PRESS. 2nd International Conference on Energy and Sustainability, Bologna, ITALY, JUN 23-25, 2009.
- [20] ZHOU, J.; CHEUNG, C. ; LEUNG, C.. **Combustion, performance, regulated and unregulated emissions of a diesel engine with hydrogen addition**. Applied Energy, 126:1–12, 2014.
- [21] JHANG, S.-R.; CHEN, K.-S.; LIN, S.-L.; LIN, Y.-C. ; LEE, C. W.. **Reducing pollutant emissions from a heavy-duty diesel engine by using hydrogen additions**. FUEL, 172:89–95, MAY 15 2016.
- [22] SERIN, H.; ŞAFAK YILDIZHAN. **Hydrogen addition to tea seed oil biodiesel: Performance and emission characteristics**. International Journal of Hydrogen Energy, 43(38):18020–18027, 2018. The 2nd International Mediterranean Science and Engineering Congress (IMSEC 2017), 25-27 October 2017, Adana, Turkey.
- [23] HOSSEINI, S. M.; AHMADI, R.. **Performance and emissions characteristics in the combustion of co-fuel diesel-hydrogen in a heavy duty engine**. Applied Energy, 205:911–925, 2017.
- [24] ALDHAI DHAWI, M.; CHIRIAC, R.; BĂDESCU, V.; DESCOMBES, G. ; PODEVIN, P.. **Investigation on the mixture formation, combustion characteristics and performance of a diesel engine fueled with diesel,**

- biodiesel b20 and hydrogen addition.** International Journal of Hydrogen Energy, 42(26):16793–16807, 2017.
- [25] BARRIOS, C. C.; DOMÍNGUEZ-SÁEZ, A. ; HORMIGO, D.. **Influence of hydrogen addition on combustion characteristics and particle number and size distribution emissions of a tdi diesel engine.** Fuel, 199:162–168, 2017.
- [26] RAHMAN, M. A.; RUHUL, A.; AZIZ, M. ; AHMED, R.. **Experimental exploration of hydrogen enrichment in a dual fuel CI engine with exhaust gas recirculation.** International Journal of Hydrogen Energy, 42(8):5400–5409, 2017.
- [27] YILMAZ, I.; GUMUS, M.. **Effects of hydrogen addition to the intake air on performance and emissions of common rail diesel engine.** Energy, 142:1104–1113, 2018.
- [28] NAGARAJAN, G.; SARAVANAN, N.. **Experimental investigation on performance and emission characteristics of dual fuel di diesel engine with hydrogen fuel.** In: SIAT 2009. The Automotive Research Association of India, jan 2009
- [29] SHARMA, P.; DHAR, A.. **Effect of hydrogen supplementation on engine performance and emissions.** International Journal of Hydrogen Energy, 43(15):7570–7580, 2018.
- [30] DIMITRIOU, P.; TSUJIMURA, T. ; SUZUKI, Y.. **Low-load hydrogendiesel dual-fuel engine operation – a combustion efficiency improvement approach.** International Journal of Hydrogen Energy, 44(31):17048–17060, 2019.
- [31] SUZUKI, Y.; TSUJIMURA, T. ; MITA, T.. **The performance of multicylinder hydrogen / diesel dual fuel engine.** SAE International Journal of Engines, 8(5):2240–2252, sep 2015.
- [32] TALIBI, M.; HELLIER, P. ; LADOMMATOS, N.. **The effect of varying egr and intake air boost on hydrogen-diesel co-combustion in ci engines.** International Journal of Hydrogen Energy, 42(9):6369–6383, 2017
- [33] HERNÁNDEZ, J. J.; LAPUERTA, M. ; BARBA, J.. **Separate effect of h2, ch4 and co on diesel engine performance and emissions under partial diesel fuel replacement.** Fuel, 165:173–184, 2016.
- [34] PANA, C.; NEGURESCU, N.; CERNAT, A.; NUTU, C.; MIRICA, I. ; FUIORESCU, D.. **Experimental aspects of the hydrogen use at diesel engine.** Procedia Engineering, 181:649–657, 2017. 10th International Conference Interdisciplinarity in Engineering, INTER-ENG 2016, 6-7 October 2016, Tirgu Mures, Romania.
- [35] KARAGÖZ, Y.; SANDALCI, T.; YÜKSEK, L.; DALKILIÇ, A. S. ; WONGWISES, S.. **Effect of hydrogen–diesel dual-fuel usage on performance, emissions and diesel combustion in diesel engines.** Advances in Mechanical Engineering, 8(8):1687814016664458, 2016.
- [36] MCCARTY, R. D.; HORD, J. ; RODER, H. M.. **Selected properties of hydrogen (engineering design data).**
- [37] RIVKIN, C.; BURGESS, R. ; BUTTNER, W.. **Hydrogen Technologies Safety Guide.** Technical Report NREL/TP–5400-60948, 1169773, Jan. 2015.
- [38] **Hydrogen Tools | A Center for Hydrogen Safety Resource.**
- [39] COMPRESSED GAS ASSOCIATION CGA. **G-5.4: Standard for Hydrogen Piping Systems at User Locations.**

- [40] GAO, J.; WANG, X.; SONG, P.; TIAN, G. ; MA, C.. **Review of the backfire occurrences and control strategies for port hydrogen injection internal combustion engines**. Fuel, 307:121553, 2022.
- [41] ALICAT. **FlowVision Software**. Acesso em: Outubro 2023.
- [42] TECHNONTON. **Fuel, Liquid Flowmeters**. Acesso em: maio 2023.
- [43] PINHO, Rodrigo Fagundes Figueira. **Modelagem termodinâmica da reforma de etanol em hidrogênio “verde” para uso no setor mobilidade**. 2023. 107 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2023.
- [44] SUN, S.; **Thermodynamic analysis of ethanol reforming for hydrogen production**; Energy; Vol. 44, pp 911 – 924, 2012.
- [45] KUHLMANN, Marco Valério. **Modelagem da cinética química de formação de NOx e CO em motores de ignição por centelha**. 2005. 130 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2005.
- [46] MERCEDES-BENZ. **OF 1721/59 4x2 piso alto para uso urbano, fretamento e rodoviário**. Disponível em: <https://m.mercedes-benz.com.br/resources/files/documentos/onibus/onibus-urbano/dados-tecnicos/OF%201721.pdf>. Acesso em: 05 set. 2023.

## 8. ANEXOS

### 8.1. Tabela dos efeitos da injeção de hidrogênio – Performance do motor

Tabela 8.1.1 - Efeitos da injeção de hidrogênio - Performance do motor

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
5.8 L, 6 cilindros, injeção direta, RC 17.09:1, 118 kW @2500 RPM, motor diesel pesado	800 & 1840 RPM, 0–100 % de carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 0.6%, 1.2 % por volume	↑ em todas as cargas	N/A	↓ em todas as cargas	N/A	N/A	N/A	[37]
1.3L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, RC 17.5:1	600, 1000 & 1500 RPM, 0.3, 0.7 & 0.9 MPa IMEP, 0 % EGR	Diesel + Hidrogênio	0% – 90 % em fração energética	↑ em alta carga, ↓ e baixa carga	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[24]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
0.799 L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, motor CFR, RC de 19:1	1100 RPM, 3.07 kW BP, 22 graus BTDC (SOI de diesel)	Diesel + Hidrogênio	0%, 22%, 53% em fração energética	↓	N/A	↑	N/A	N/A	N/A	[46]
1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, ignição por compressão, RC de 17.5:1, potência máxima de 5.2 kW @ 1500 RPM	1500 RPM, 5.2 kW IP, 23 graus BTDC (SOI de diesel)	Diesel + Hidrogênio	0%, 11%, 17 %, 30%, 42% em fração energética	BTE ↑	N/A	N/A	↓	N/A	N/A	[47]
0.799 L, 1 cilindro, 4 tempos, aspirado naturalmente, arrefecido à água, motor CFR, RC de 19:1	1100 RPM, 40% – 100 % de carga, 22 graus BTDC (SOI de diesel)	Diesel + Hidrogênio	0%, 30% em fração energética	↓ em todas os cargas	N/A	↑ em todas as cargas	N/A	N/A	N/A	[48]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
0.507 L, 1 cilindro, aspirado naturalmente, ignição por compressão, potência máxima de 9.0 kW, velocidade máxima 3000 RPM	1080–1800 RPM, variable injection timing	Diesel + Hidrogênio	0–8 lpm	↑ em todas as velocidades	N/A	↓ em todas as velocidades	N/A	N/A	N/A	[49]
1.461 L, 4 cilindros, 4 tempos, arrefecido à água, motor à diesel turbo, potência máxima 48 kW	1750 RPM, 50–100 N.m de carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 7.12%, 8.93%, 12.63%, 14.27%, 17.35%, 23.75% em fração energética	↑ em todas as cargas exceto em 100 N.m	N/A	N/A	↓ em todas as cargas exceto em 100 N.m	N/A	N/A	[36]
4 cilindros, injeção direta, aspirado naturalmente, RC de 17:1, potência máxima 49 kW @ 1800 RPM	0–38 kW de carga	Diesel + 5% BioDiesel + Hidrogênio	0 %, 5 %, 10 %, 15 %, 20 % em fração energética	N/A	N/A	↓ para o H2O à 4.8 kW	N/A	N/A	N/A	[50]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
2.0 L, 4 cilindros, turbo, motor de injeção direta de alta velocidade, RC de 18.2:1	1500 & 2500 RPM, 2.5 & 5.0 bar IMEP de carga, SOI de 3–12 CAD BTDC	ULSD + Hidrogênio	0% - 45.15% em fração energética	↓ em todas as velocidades e cargas	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[51]
Motor à diesel D2156 MTN8	1450 RPM, 55 % de carga	Diesel + Hidrogênio	0% - 3,9% em fração energética	N/A	N/A	N/A	↓	N/A	N/A	[44]
2.0 L, 4 cilindros, turbo, injeção direta, motor TDI, potência máxima 103 kW @ 4000 RPM	2000–3000 RPM, 15%–45% de carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 25% em fração energética	↓ na maioria das cargas e velocidades	N/A	↓ em todas as velocidades e cargas	N/A	N/A	N/A	[34]
4 cilindros, 4 tempos, arrefecido à água, motor à diesel aspirado naturalmente, RC de 17.5:1	1400 & 2400 RPM, em alta carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 2.47%, 3.64 %, 4.87 % em fração energética	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[33]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
2.0 L, 4 tempos, arrefecido à água, motor à diesel com injeção via common-rail	1200 RPM, 8.5–11.5 bar IMEP de carga	Diesel + Hidrogênio	0% – 40 % em fração energética	↓	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[42]
4.334 L, 4 cilindros, aspirado naturalmente, motor de injeção direta	parado - 2560 RPM, 0% – 95 % de carregamento	Diesel + Hidrogênio	0%, 10%, 20%, 30% em fração energética	N/A	N/A	↓	N/A	N/A	N/A	[52]
1.999 L, 1 cilindro, motor à diesel com injeção via common- rail, RC de 15.78:1, máx. IP 1300 bar	1500 RPM, 90 & 105 N.m de carga, 0 & 15% EGR	Diesel + Hidrogênio	0%, 5%, 10%, 15% em fração energética	↓	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[43]
2.44 L, 1 cilindro, motor Caterpillar, RC de 15.1:1	1600 rpm, 1.84 bar IP	Diesel + Hydrogen	0%, 5%, 11%, 16.5 %, 28.5 %, 39%, 54%, 70 %	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[32]



Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
765 cc, Monocilíndrico, quatro tempos, naturalmente aspirado e arrefecido a água	(750, 900, 1100, 1400, 1750, 2100) RPM com 100% de carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 25%, 50%	↓	N/A	↑	N/A	↓	↓	[45]
553 cc, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água	1500 RPM parado, 25%, 75% e 100% de carga	Diesel + Hidrogênio	8,8%-28,2%	↓	N/A	N/A	↓	N/A	N/A	[38]
			10,1%-41,9%	↑	N/A	N/A	↑	N/A	N/A	
			9,6%-40,2%	↑	N/A	N/A	↑	N/A	N/A	
0.5 L, monocilíndrico, naturalmente aspirado e arrefecido à água	1200 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 31,3%	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[27]
Audi/VW TDI 1.896 L, 4 cilindros	1900 RPM e 2500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 15,75%	↓ em baixa carga	N/A	↓	N/A	N/A	N/A	[53]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
5.2 L, 4 cilindros	20 kW @ 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0%-98%	↓ com H2 menor que 80% e ↑ com H2 maior que 80%	↑	N/A	N/A	N/A	N/A	[25]
	40 kW @ 1500 RPM		0% - 85%	↑	↑	N/A	N/A	N/A	N/A	
5.2 L, 4 cilindros	20 kW @ 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 69%	↓	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[41]
	40 kW @ 1500 RPM		0% - 83%	↑	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	
	60 kW @ 1500 RPM		0% - 58%	↑	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	
0.5 L, motor à diesel leve	1200 RPM	Diesel + Hidrogênio	0%, 18%, 26%, 36%, 44%, 54%, 63%	N/A	Con-stante	N/A	N/A	N/A	N/A	[25]
2.0 L, motor à diesel pesado	1250 RPM com 50% de carga		0%, 6%, 12%, 23%, 34%, 41%	N/A	Con-stante	N/A	N/A	N/A	N/A	

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
0.661 L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água	1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 20% com cargas de 25%, 50% e 75%	↓ em todas as cargas	N/A	N/A	↑ em todas as cargas	↓ em todas as cargas	N/A	[39]
5.2 L, 4 cilindros	20 kW @ 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 80%	↓	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[40]
3.6 L, Mitsubishi Canter 4D34, 4 cilindros, arrefecido à água, naturalmente aspirado, injeção direta de diesel	1200 RPM - 2600 RPM	20% CME + 80% diesel	0.9% a 4,1% de HES	N/A	N/A	↓	N/A	↑	↑	[54]
0.661 L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, injeção direta de diesel	1500 RPM com alta carga	20% mahua biodiesel + 80% diesel	21.74% a 63,76% de HES	↑	N/A	↓	N/A	N/A	N/A	[55]
3.907 L, Mitsubishi 4D34-2A, 4 cilindros, 4 tempos	N/A	20% microalgas biodiesel + 80% diesel	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	↑	↑	[56]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
Kirloskar, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água	1500 RPM com 0%, 25%, 50%, 75% e 100% de carga	40% microalgas biodiesel + 60% diesel	6.03% a 22.5% de HES	↑ com alta carga	N/A	N/A	↓	N/A	N/A	[35]
				↓ com EGR	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	
Isuzu 4HF1, Inline 4C	1800 RPM com 10%, 30%, 50%, 70% e 90 % de carga	50% palma biodiesel + 50% ULSDiesel	10% e 20%	De- cresce em carga baixa e aumenta em cargas media e altas	N/A	cresce em cargas baixa e média e de- scresce em cargas altas	N/A	N/A	N/A	[26]
DI, Tractor engine, 4C	1400 a 2400 RPM com 100% de carga	20% colza biodiesel + 80% diesel	0%, 2.6% e 4.065%	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[33]
Diesel engine DI Mitsubishi 4D34-2A de 3907 cc	1200 a 2800 RPM com 100% de carga	20% biodiesel de óleo de cozinha residual + 80% diesel	0%, 10% e 20%	N/A	N/A	↓	N/A	N/A	↑	[31]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				BTE	BMEP	BSFC	BSEC	BP	Torque	
661 cc Kirloskar 240, 1C, 4S, WC	Rotação constante em 1500 RPM	20% semente de chá biodiesel + 80% diesel	flow rate: 4, 8 e 12%	↑	N/A	↓	N/A	N/A	N/A	[57]
Kubota RK-125, 624 cc, monocilíndrico	10% a 60% de carga a 1800 RPM	Diesel + Hidrogênio	0%, 10% e 20%	↑ com alta carga	N/A	↓	N/A	N/A	N/A	[58]
Diesel engine 638 cc, 4S, DI	carga parcial a 1500 RPM constante	Diesel + Hidrogênio	50% a 78%	↓	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	[59]
Kirloskar TV1—single cylinder, 4S	20% a 80% de carga com 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	20% a 64%	↑	N/A	↓	↓	N/A	N/A	[60]

## 8.2. Tabela dos efeitos da injeção de hidrogênio – emissões

Tabela 8.2.1 - Efeitos da injeção de hidrogênio - Emissões

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
5.8 L, 6 cilindros, injeção direta, RC 17.09:1, 118 kW @2500 RPM, motor diesel pesado	800 & 1840 RPM, 0–100 % de carga	Diesel + Hidrogênio	0% – 90 %	↓ em todas as cargas	↓ em todas as cargas	↓ parado e em baixa carga, ↑ e média e alta carga	THC ↑ em todas as cargas exceto parado	N/A	N/A	[37]
1.3L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, RC 17.5:1	600, 1000 & 1500 RPM, 0.3, 0.7 & 0.9 MPa IMEP, 0 % EGR	Diesel + Hidrogênio		↓ em todas as cargas	↓ em todas as cargas	↑ em alta carga, ↓ e baixa carga	↓ em baixa carga	N/A	N/A	[24]
0.799 L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, motor CFR, RC de 19:1	1100 RPM, 3.07 kW BP, 22 graus BTDC (SOI de diesel)	Diesel + Hidrogênio		↓ em todas as cargas	N/A	↑	↓	↓	N/A	[46]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, ignição por compressão, RC de 17.5:1, potência máxima de 5.2 kW @ 1500 RPM	1500 RPM, 5.2 kW IP, 23 graus BTDC (SOI de diesel)	Diesel + Hidrogênio	0%, 11%, 17 %, 30%, 42%	↓	↓	↑	↑	↓	N/A	[47]
0.799 L, 1 cilindro, 4 tempos, aspirado naturalmente, arrefecido à água, motor CFR, RC de 19:1	1100 RPM, 40% – 100 % de carga, 22 graus BTDC (SOI de diesel)	Diesel + Hidrogênio	0%, 30%	↓ em todas as cargas	↓ em todas as cargas	↓ em todas as cargas exceto 100%	↑ em todas as cargas	↓ em todas as cargas	N/A	[48]
0.507 L, 1 cilindro, aspirado naturalmente, ignição por compressão, potência máxima de 9.0 kW, velocidade máxima 3000 RPM	0, 2, 4, 6 e 8 LPM de H2 a 1260 RPM;	Diesel + Hidrogênio	0, 2, 4, 6 e 8 lpm	N/A	N/A	↑	N/A	N/A	↓ até 4 LPM e depois ↑ ate 8 LPM	[49]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
1.461 L, 4 cilindros, 4 tempos, arrefecido à água, motor à diesel turbo, potência máxima 48 kW	1750 RPM, 50–100 N.m de carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 7.12%, 8.93%, 12.63%, 14.27%, 17.35%, 23.75%	N/A	↓ em todas as cargas	↓ para o H2O e ↑ para o H40 em todas as cargas, exceto no uso do H40 à 100 Nm	↓ em todas as cargas	N/A	N/A	[36]
4 cilindros, injeção direta, aspirado naturalmente, RC de 17:1, potência máxima 49 kW @ 1800 RPM	0–38 kW de carga	Diesel + 5% BioDiesel + Hidrogênio	0 %, 5 %, 10 %, 15 %, 20 %	N/A	↓ para todas as cargas	N/A	N/A	N/A	N/A	[50]



Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
2.0 L, 4 cilindros, turbo, motor de injeção direta de alta velocidade, RC de 18.2:1	1500 & 2500 RPM, 2.5 & 5.0 bar IMEP de carga, SOI de 3–12 CAD BTDC	ULSD + Hidrogênio	0% - 45.15%	↓	N/A	↑	N/A	↓	N/A	[51]
Motor à diesel D2156 MTN8	1450 RPM, 55 % de carga	Diesel + Hidrogênio	0% - 3,9%	N/A	N/A	↓ em todas as cargas exceto 100%	N/A	↓	N/A	[44]
2.0 L, 4 cilindros, turbo, injeção direta, motor TDI, potência máxima 103 kW @ 4000 RPM	2000–3000 RPM, 15%–45% de carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 25%	Comparável em todas as velocidades e cargas	↓ em todas as cargas e velocidades	N/A	↓ em todas as velocidades e cargas	N/A	↓ em todas as cargas e velocidades	[34]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
4 cilindros, 4 tempos, arrefecido à água, motor à diesel aspirado naturalmente, RC de 17.5:1	1400 & 2400 RPM, em alta carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 2.47%, 3.64 %, 4.87 %	↓ em baixa velocidade, ↑ em alta velocidade	N/A	↑ nas duas velocidades de operação	↑ em baixa velocidade, ↓ em alta velocidade	↓ nas duas velocidades de operação	N/A	[33]
2.0 L, 4 tempos, arrefecido à água, motor à diesel com injeção via common-rail	1200 RPM, 8.5–11.5 bar IMEP de carga	Diesel + Hidrogênio	0% – 40 %	N/A	↓ em todas as cargas	↑ além do H10 em todas as cargas	"constante" em todas as cargas	N/A	↑ em todas as cargas	[42]
4.334 L, 4 cilindros, aspirado naturalmente, motor de injeção direta	parado - 2560 RPM, 0% – 95 % de carregamento	Diesel + Hidrogênio	0%, 10%, 20%, 30%	↓	↓	↑	↑ em todas as cargas	N/A	↓ em todas as velocidades e cargas	[52]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
1.999 L, 1 cilindro, motor à diesel com injeção via common-rail, RC de 15.78:1, máx. IP 1300 bar	1500 RPM, 90 & 105 N.m de carga, 0 & 15% EGR	Diesel + Hidrogênio	0%, 5%, 10%, 15%	↓ em todos EGR e cargas	N/A	↑ em todos EGR e cargas	Comparable	N/A	↓ em todos EGR e cargas	[43]
2.44 L, 1 cilindro, motor Caterpillar, RC de 15.1:1	1600 rpm, 1.84 bar IP	Diesel + Hydrogen	0%, 5%, 11%, 16.5 %, 28.5 %, 39%, 54%, 70 %	↑	↓	↓	↑	N/A	N/A	[32]
765 cc, Monocilíndrico, quatro tempos, naturalmente aspirado e arrefecido a água	(750, 900, 1100, 1400, 1750, 2100) RPM com 100% de carga	Diesel + Hidrogênio	0%, 25%, 50%	↓	↓	↑	↑	↓	N/A	[45]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho					Ref.	
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça		Mat. Partic.
553 cc, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água	1500 RPM parado, 25%, 75% e 100% de carga	Diesel + Hidrogênio	8,8%-28,2%	↓	↓	↓ em 25% e 50% de carga, exceto em 75% e 100% de carga onde ↑	↓	↓	N/A	[38]
			10,1%-41.9%	↓	↓	↑ em todos os casos, exceto em 25% de carga onde ↓	↓	↓ em todos os casos, exceto em 25% de carga onde foi indiferente	N/A	

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
0.5 L, monocilíndrico, naturalmente aspirado e arrefecido à água	1200 RPM	Diesel + Hidrogênio	9,6%-40,2%	↓	↓	↑ em todos os casos, exceto em 25% de carga onde ↓	↓	↓ em todos os casos, exceto em 25% de carga onde foi indiferente	N/A	[27]
			0% - 31,3%	↓	↑	↓ em baixa carga e ↑ em médias e altas cargas	↓	N/A	↓	
			0% - 15,75%	↓	N/A	↓	↑	↓	N/A	
Audi/VW TDI 1.896 L, 4 cilindros	1900 RPM e 2500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 15,75%	↓	N/A	↓	↑	↓	N/A	[53]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
5.2 L, 4 cilindros	20 kW @ 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0%-98%	↓	↓	↑ com H2 menor que 80% e ↓ com H2 maior que 80%	N/A	N/A	N/A	[25]
	40 kW @ 1500 RPM		0%-85%	↓	↓	↑ com H2 maior que 80% e ↓ com H2 menor que 80%	↑ com H2 maior que 80%	N/A	N/A	
	20 kW @ 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 69%	↓	↓	↓	↓	N/A	N/A	[41]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
0.5 L, motor à diesel leve	40 kW @ 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 83%	↓	↓	con- stante	con- stante para baixos/m HES e ↑ para altos HES	N/A	N/A	[25]
	60 kW @ 1500 RPM		0% - 58%	↓	↓	↑	↓ em baixos/m HES e ↑ em altos HES	N/A	N/A	
	1200 RPM		0%, 18%, 26%, 36%, 44%, 54%, 63%	↓	N/A	↑	↑	N/A	↓	
	1250 RPM com 50% de carga		0%, 6%, 12%, 23%, 34%, 41%	↓	N/A	↓	N/A	N/A	N/A	

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
0.661 L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água	1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 20% com cargas de 25%, 50% e 75%	↓ em todas as cargas	↓ em todas as cargas	↓ com cargas de 25% e 50% mas ↑ com carga de 75%	↑ com até 5% HES em todas as cargas, ↓ a partir de 5% HES em todas as cargas	N/A	↑ com até 5% HES com cargas de 50% e 75%, ↓ a partir de 5% HES com cargas de 50% e 75%, ↓ com carga de 25%	[39]



Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
5.2 L, 4 cilindros	20 kW @ 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	0% - 80%	↓	N/A	↑ para baixos e médios HES, ↓ para altos HES	↓	N/A	N/A	[40]
3.6 L, Mitsubishi Canter 4D34, 4 cilindros, arrefecido à água, naturalmente aspirado, injeção direta de diesel	1200 RPM - 2600 RPM	20% CME + 80% diesel	0.9% a 4,1% de HES	↓	N/A	↑	N/A	N/A	N/A	[54]
0.661 L, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água, injeção direta de diesel	1500 RPM com alta carga	20% mahua biodiesel + 80% diesel	21.74% a 63,76% de HES	↓	N/A	↑	↓	N/A	N/A	[55]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
3.907 L, Mitsubishi 4D34-2A, 4 cilindros, 4 tempos	N/A	20% microalgas biodiesel + 80% diesel	N/A	↓	↓	↑	N/A	N/A	N/A	[56]
Kirloskar, 1 cilindro, 4 tempos, arrefecido à água	1500 RPM com 0%, 25%, 50%, 75% e 100% de carga	40% microalgas biodiesel + 60% diesel	6.03% a 22.5% de HES	↓	↑	N/A	↓	↓	N/A	[35]
				con- stante com EGR	↓ com EGR	↓	↑ com EGR	↑ com EGR e alta carga	N/A	
Isuzu 4HF1, Inline 4C	1800 RPM com 10%, 30%, 50%, 70% e 90 % de carga	50% palma biodiesel + 50% ULSDiesel	10% e 20%	N/A	↓	↓	↓	↓	N/A	[26]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
DI, Tractor engine, 4C	1400 a 2400 RPM com 100% de carga	20% colza biodiesel + 80% diesel	0%, 2.6% e 4.065%	↓	N/A	De-cresce em baixa rotação (1400 RPM) e cresce em alta rotação (2400 RPM)	↓	↓	N/A	[33]
Diesel engine DI Mitsubishi 4D34-2A de 3907 cc	1200 a 2800 RPM com 100% de carga	20% biodiesel de óleo de cozinha residual + 80% diesel 20% semente	0%, 10% e 20%	↓	↓	↑	N/A	N/A	N/A	[31]
661 cc Kirloskar 240, 1C, 4S, WC	Rotação constante em 1500 RPM	de chá biodiesel + 80% diesel	flow rate: 4, 8 e 12%	↓	↓	↑	N/A	N/A	N/A	[57]

Especificações do motor	Condições de operação	Mistura Combustível	Fração em energia	Desempenho						Ref.
				CO	CO <sub>2</sub>	NO <sub>x</sub>	HC	Fumaça	Mat. Partic.	
Kubota RK-125, 624 cc, monocilíndrico	10% a 60% de carga a 1800 RPM	Diesel + Hidrogênio	0%, 10% e 20%	↓	↓	↑	↑	↓	N/A	[58]
Diesel engine 638 cc, 4S, DI	carga parcial a 1500 RPM constante	Diesel + Hidrogênio	50% a 78%	↓	↓	↑	↓	↓	N/A	[59]
Kirloskar TV1—single cylinder, 4S	20% a 80% de carga com 1500 RPM	Diesel + Hidrogênio	20% a 64%	↓	↓	↑	↓	↓	N/A	[60]

### 8.3. Código para o cálculo da simulação dos produtos da combustão incompleta do Diesel B12 com injeções parciais (HES = 0%, 5%, 15% e 30%) de hidrogênio ( $H_2$ )

```
clc;
close all;
clear all;

% Massa atômica
PMC = 12.011;
PMH = 1.008;
PMO = 15.999;
PMN = 14.007;

% Composição mássica (%mássica) - B12 + H0
PORCC = 0.8363;
PORCH = 0.1487;
PORCO = 0.0150;
carb = 19;
A=[PMH PMO -1;
PMH 0 -PORCH;
0 PMO -PORCO];
C=[-PMC;0;0];
B=inv(A)*C;
x=carb*B(1);
y=carb*B(2);
MM_combustivel = carb*B(3);
PM_H2O = 2*PMH+PMO;
PM_COMBUSTIVEL = carb*PMC+x*PMH+y*PMO;
PM_CO = PMC+PMO;
PM_CO2 = PMC+2*PMO;
PM_H2 = 2*PMH;
PM_CH4 = PMC+4*PMH;
PM_O2 = PMO*2;

% Lambda = ER
%GERAR UM VETOR TÃO REFINADO QUANTO O CASO DAS FIGURAS GERADAS PELA ANN
% lambda = [1.13;1.19;1.24;1.29;1.44;1.48;1.54;1.55;1.57;1.58;1.62;1.63;1.65;1.70;1.72;1.73];
% l1=size(lambda,1);
lambda = linspace(1.13,1.73,5)';
l1=size(lambda,1);

% Umidade relativa
%GERAR UM VETOR TÃO REFINADO QUANTO O CASO DAS FIGURAS GERADAS PELA ANN
% TT = [700;800;900;1000;1100;1200];
TT = linspace(700,1200,5)';
```

```

J=size(TT,1);
for k=1:11
    for j=1:J
        L =(k-1)*J+j;
        T(L)=TT(j);
        LAMBDA(L) = lambda(k);
        beq(:,L) = [ carb; % mol C fed
                    x; % mol H fed
                    y+2*LAMBDA(L)*(carb+x/4-y/2); % mol O fed
                    2*LAMBDA(L)*(carb+x/4-y/2)*3.76]; % mol N fed
        LL = L;
    end
end

%Temperatura de referência
T1=298;

% restrições para conservação de elementos
% CO %H2O %CO2 %H2 %CH4 %O2 %N2 %NO
Aeq = [ 1 0 1 0 1 0 0 0 ; % C balance
        0 2 0 2 4 0 0 0 ; % H balance
        1 1 2 0 0 2 0 1 ; % O balance
        0 0 0 0 0 0 2 1 ]; % N balance

%Lower bound
LB =[1e-18 1e-18 1e-18 1e-18 1e-18 1e-18 1e-18 1e-18];

% Chute inicial
x0 = [0.1 0.1 0.1 0.1 0.1 0.1 0.1 0.1];
options1 = optimset('Display','off','Algorithm','sqp');

for L=1:LL
    count = 0;
    tol=1000;
    param = T(L);
    while (tol) > 0.01
        if count > 100
            break;
        end
        [r,fval1,exitflag1]= fmincon(@(r)func(r,param),x0,[],[],Aeq,beq(:,L),LB,[],[],options1);
        count = count + 1;
        COUNT(L)=count;
        TOL(L)=tol;
    end

    n_H2(L) = abs(r(4));

```

```

n_CO(L) = abs(r(1));
n_CO2(L) = abs(r(3));
n_H2O(L) = abs(r(2));
n_CH4(L) = abs(r(5));
n_O2(L) = abs(r(6));
n_N2(L) = abs(r(7));
n_NO(L) = abs(r(8));

nc_CO2(L) = carb;
nc_H2O(L) = x/2;
nc_O2(L) = (LAMBDA(L)-1)*(carb+(x/4)-(y/2));
nc_N2(L) = 3.76*LAMBDA(L)*(carb+(x/4)-(y/2));

Exitflag1(L) = exitflag1;
Fval1(L)= fval1;
ntotal(L)= n_H2(L) + n_CO(L) + n_CO2(L) + n_CH4(L) + n_H2O(L) + n_O2(L) + n_N2(L) + n_NO(L);

ntotalc(L) = nc_CO2(L) + nc_H2O(L) + nc_O2(L) + nc_N2(L);

n_syngas(L) = n_H2(L) + n_CO(L)+n_O2(L);
x_H2(L)= 1e4*(n_H2(L)/ntotal(L));
x_CO(L) = 1e4*(n_CO(L)/ntotal(L));
x_CO2(L)= 1e4*(n_CO2(L)/ntotal(L));
x_O2(L) = n_O2(L)/ntotal(L);
x_CH4(L) = n_CH4(L)/ntotal(L);
x_H2O(L) = 1e4*(n_H2O(L)/ntotal(L));
x_N2(L) = n_N2(L)/ntotal(L);
x_NO(L) = 1e4*(n_NO(L)/ntotal(L));

xc_CO2(L) = nc_CO2(L)/ntotalc(L);
xc_H2O(L) = nc_H2O(L)/ntotalc(L);
xc_O2(L) = nc_O2(L)/ntotalc(L);
xc_N2(L) = nc_N2(L)/ntotalc(L);

L=L+1;
end

for k=1:11
    for j=1:J
        x_mol_CO(j,k) = x_CO(k*J-J+j);
        x_mol_H2(j,k) = x_H2(k*J-J+j);
        x_mol_CO2(j,k) = x_CO2(k*J-J+j);
        x_mol_CH4(j,k) = x_CH4(k*J-J+j);
        x_mol_H2O(j,k) = x_H2O(k*J-J+j);
        x_mol_N2(j,k) = x_N2(k*J-J+j);
        x_mol_NO(j,k) = x_NO(k*J-J+j);
        x_mol_O2(j,k) = x_O2(k*J-J+j);
    end
end

```

```
end
```

```
%Gráficos
```

```
[X,Y] = meshgrid(lambda,TT);  
figure(1);  
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_H2);  
clabel(C,h);  
title('H2 [ppm]')  
xlabel("ar/combustível")  
ylabel("Temperatura [K]")
```

```
figure(2);  
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_CO);  
clabel(C,h);  
title('CO [ppm]')  
xlabel("ar/combustível")  
ylabel("Temperatura [K]")
```

```
figure(3);  
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_CO2);  
clabel(C,h);  
title('CO2 [ppm]')  
xlabel("ar/combustível")  
ylabel("Temperatura [K]")
```

```
figure(4);  
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_CH4);  
clabel(C,h);  
title('CH4')  
xlabel("ar/combustível")  
ylabel("Temperatura [K]")
```

```
figure(5);  
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_H2O);  
clabel(C,h);  
title('H2O [ppm]')  
xlabel("ar/combustível")  
ylabel("Temperatura [K]")
```

```
figure(6);  
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_N2);  
clabel(C,h);  
title('N2')  
xlabel("ar/combustível")  
ylabel("Temperatura [K]")
```



```

figure(7);
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_NO);
clabel(C,h);
title('NO [ppm]')
xlabel("ar/combustível")
ylabel("Temperatura [K]")

figure(8);
[C,h] = contourf(X,Y,x_mol_O2);
clabel(C,h);
title('O2')
xlabel("ar/combustível")
ylabel("Temperatura [K]")

% Gráfico do perfil da combustão completa
figure(9);
cor_CO2 = [0 0.4 0]; % Verde escuro
cor_H2O = [1 1 0]; % Amarelo
cor_O2 = [1 0 0]; % Vermelho
cor_N2 = [0 0 1]; % Azul
y1 = xc_CO2;
y2 = xc_H2O;
y3 = xc_O2;
y4 = xc_N2;
figura_tamanho = [10 6];
densidade_pontos = 300;
set(gcf, 'Units', 'inches', 'Position', [0, 0, figura_tamanho], 'PaperUnits', 'inches',
'PaperSize', figura_tamanho, 'PaperPosition', [0, 0, figura_tamanho]);
set(gca, 'FontSize', 12);
plot(LAMBDA, y1, 'o-', 'Color', cor_CO2, 'LineWidth', 2);
hold on;
plot(LAMBDA, y2, 's-', 'Color', cor_H2O, 'LineWidth', 2);
plot(LAMBDA, y3, '^-', 'Color', cor_O2, 'LineWidth', 2);
plot(LAMBDA, y4, 'd-', 'Color', cor_N2, 'LineWidth', 2);
xlabel('ar/combustível');
ylabel('fração molar');
title('Perfil da combustão completa');
legend('CO2', 'H2O', 'O2', 'N2');
grid on;
nome_arquivo = 'perfil_combustao_alta_resolucao_cores';
print(nome_arquivo, '-dpng', ['-r' num2str(densidade_pontos)]);
disp(['Figura salva como ' nome_arquivo '.png']);

```

```

function G = func(nj,T)
    % Temperatura da reação

```

```

R = 8.314e3; % J/kmol K
P = 1; % atm, this is the total pressure in the reactor
Po = 1; % atm, this is the standard state pressure

% Calor de Formacao das Especies a 298K em J/kmol (Entalpias)
Hf298 = [
-110530000 % CO
-241814000 % H2O
-393510000 % CO2
0.0 % H2
-74520000 % CH4
0.0 % O2
0.0 % N2
90250000]; % NO

Gf298 = [
-137150000 %CO
-228590000 % H2O
-394370000 % CO2
0.0 % H2
-50490000 % CH4
0.0 % O2
0.0 % N2
86570000]; % NO

% Entropia de Formacao das Especies a 298K em J/kmol
Sf298 = (Hf298-Gf298)/298.15;

% % Energia de Gibbs (CO - H2O - CO2 - H2 - CH4 - O2 - N2 - NO)
% % A B C D E (em J/kmol K)
WB = 1e3*[30.91      -1.2926e-2  2.81e-5      -1.27574e-8 0 % CO
32.24685  1.927605e-3 1.05568e-5  -3.603e-9 0 % H2O
19.8045  7.34967e-2  -5.58927e-5 1.71639e-8 0 % CO2
27.13536 9.2736e-3   -1.38096e-05 7.64064e-9 0 % H2
19.2516  5.213975e-2 4.01075e-6  -1.13905e-8 0 % CH4
28.15912 -3.1999e-6  1.72795e-5  -1.05597e-8 0 % O2
31.09443 -1.344624e-2 2.68925e-5  -1.17655e-8 0 % N2
29.40588 -9.30186e-4  9.75195e-6  -4.20084e-9 0]; % NO

% 'CO' H2O' 'CO2' 'H2' 'CH4' 'O2'};
t = T/298.15;
T_H = [(T-298.15); (T^2-(298.15^2))/2; (T^3-(298.15^3))/3; (T^4-(298.15^4))/4;0];
T_S = [log(T/298.15); (T-298.15); (T^2-(298.15^2))/2; (T^3-(298.15^3))/3;0];
H = Hf298 + WB*T_H; % (H - H_298.15) J/kmol
S = Sf298 + WB*T_S; % absolute entropy J/kmol/K
Gjo = H - T*S; % Gibbs energy of each component at 1000 K

```

```
% Equações
% 'CO' 'H2O' 'CO2' 'H2' 'CH4' 'O2' 'N2' 'NO'};
Enj = sum(abs(nj));
G = abs(nj(1)).*((Gjo(1)/(R*T) + log(abs(nj(1))/Enj*P/Po)))...
+ abs(nj(2)).*((Gjo(2)/(R*T) + log(abs(nj(2))/Enj*P/Po)))...
+ abs(nj(3)).*((Gjo(3)/(R*T) + log(abs(nj(3))/Enj*P/Po)))...
+ abs(nj(4)).*((Gjo(4)/(R*T) + log(abs(nj(4))/Enj*P/Po)))...
+ abs(nj(5)).*((Gjo(5)/(R*T) + log(abs(nj(5))/Enj*P/Po)))...
+ abs(nj(6)).*((Gjo(6)/(R*T) + log(abs(nj(6))/Enj*P/Po)))...
+ abs(nj(7)).*((Gjo(7)/(R*T) + log(abs(nj(7))/Enj*P/Po)))...
+ abs(nj(8)).*((Gjo(8)/(R*T) + log(abs(nj(8))/Enj*P/Po)));
```

```
end
```