



Felipe Leal da Costa Moutella

**Simulação Numérica de Motores
Bicombustível Diesel – Gás Natural**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio.

Orientador: Prof. Sergio Leal Braga

Co-Orientador: Prof. Antoine Albrecht

Rio de Janeiro
Setembro de 2009



Felipe Leal da Costa Moutella

**Simulação Numérica de Motores
Bicombustível Diesel – Gás Natural**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica do Departamento de Engenharia Mecânica do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Sergio Leal Braga

Orientador

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Prof. Antoine Albrecht

Co-Orientador

Institut National Polytechnique de Toulouse

Prof. Carlos Valois Maciel Braga

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Prof. Marcos Sebastião de Paula Gomes

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro

Prof. José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 01 de setembro de 2009

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e dos orientadores.

Felipe Leal da Costa Moutella

Formado em Engenharia com dupla habilitação em Mecânica e Produção Mecânica pela PUC-Rio em dezembro de 2006. Atualmente trabalha na indústria de exploração de petróleo.

Ficha Catalográfica

Moutella, Felipe Leal da Costa

Simulação Numérica de Motores Bicombustível Diesel - Gás Natural / Felipe Leal da Costa Moutella; Orientadores: Prof. Sergio Leal Braga, Dr. Antoine Albrecht – Rio de Janeiro: Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica, 2009.

71 f.: il.; 29,7 cm

Dissertação (Mestrado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Mecânica – Teses. 2. Motor Diesel. 3. Gás Natural. 4. Diesel. 5. Simulação Numérica. I. Braga, Sergio Leal. II. Albrecht, Antoine. III. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica. IV. Título.

CDD: 621

Aos meus pais Marcos e Elisabete, e irmã Erica, pelo amor e confiança.
A Juliana, pelo carinho e pelas incontáveis horas de paciência e apoio incondicional.

Agradecimentos

Ao Professor Sergio Leal Braga, pela confiança, apoio e oportunidade única a mim estendida.

A Antoine Albrecht, pelo suporte integral, companheirismo e honra de trabalhar ao seu lado. *Ça n'aurait pas été possible sans ton aide!*

Ao Departamento de Engenharia Mecânica da PUC-Rio, através de seus professores de graduação, pós-graduação e corpo administrativo, pela excelente estrutura acadêmica proporcionada.

Ao Instituto Tecnológico da PUC-Rio (ITUC), através de seus funcionários administrativos, pela ajuda ao longo deste mestrado. Agradecimento especial a Leandro Góis, pela paciência em resolver questões de informática “impossíveis”.

Ao IFP, pela oportunidade de estágio e disponibilização de uma estrutura única no mundo.

A Petróleo Brasileiro S.A. (Petrobras), pelo suporte financeiro a este projeto.

A Stephane Richard, Pierre Gaultier, Cécile Pera e Antonio Pires da Cruz, pelo suporte técnico fornecido durante meu estágio no IFP.

A Julio Egúsquiza, por dividir sua experiência e presteza em ajudar.

Aos meus amigos da graduação, pela ajuda durante o curso e incentivo para meu ingresso no programa de mestrado.

Resumo

Moutella, Felipe Leal da Costa; Braga, Sergio Leal; Albrecht, Antoine. **Simulação Numérica de Motores Bicombustível Diesel - Gás Natural.** Rio de Janeiro, 2009. 71p. Dissertação de Mestrado – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Mecânica.

A adaptação de um simulador numérico para a simulação da operação bicombustível Diesel-gás em motores com ignição por compressão foi realizada. O código-fonte em questão foi desenvolvido ao longo dos últimos anos pelo IFP, e uma modificação ao modelo da auto-ignição nele contido foi concluída neste estudo. As diversas etapas necessárias para a adaptação são apresentadas. Considerações foram feitas em relação à literatura existente para o assunto, e as hipóteses realizadas foram verificadas numericamente sempre que possível. Uma equação que relaciona os números de octanas do Diesel e do gás natural com a qualidade da auto-ignição de sua combinação resultante é proposta. Foi construída uma extensa base de dados necessária ao funcionamento do modelo, contendo as taxas de reação em função dos parâmetros físicos da mistura. Por fim, foi feita uma análise qualitativa de simulações bicombustível para um motor Diesel.

Palavras-chave

Motor Diesel; Gás Natural; Diesel; Simulação Numérica.

Abstract

Moutella, Felipe Leal da Costa; Braga, Sergio Leal (Advisor); Albrecht, Antoine (Co-Advisor). **Numerical Simulation of Dual-Fuel Diesel-Natural Gas Engines**. Rio de Janeiro, 2009. 71p. MSc. Dissertation – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Mechanical Engineering Department.

The adaptation of a numerical simulator for the dual fuel Diesel-gas combustion in compression ignition engines was accomplished. The referred source code has been developed for the past years by the IFP, and a modification of its auto-ignition model was concluded during this study. The various steps needed for this adaptation are presented. All hypotheses were numerically verified when possible. A relation between auto-ignition quality and the combination of the octane numbers of Diesel and natural gas is proposed. A comprehensive reaction rates database required by the model was constructed. Finally, a qualitative analysis of dual fuel simulations in a Diesel engine was conducted.

Keywords

Diesel Engine; Natural Gas; Diesel; Numerical Simulation.

Sumário

1.	Introdução	14
1.1	Motivação	16
1.2	Objetivo.....	19
1.3	Metodologia	20
2.	Revisão Bibliográfica	21
2.1	Motores Diesel-gás	21
2.2	Simulação numérica Diesel-gás.....	24
2.3	IFP-C3D.....	25
3.	Modelo da Auto-Ignição	30
3.1	Descrição do modelo para combustíveis de composição única.....	31
3.1.1	Modelagem dos tipos da auto-ignição	33
3.1.2	Simulações químicas, pós-processamento e construção da base de dados	34
3.1.3	Equacionamento da auto-ignição.....	36
3.2	Extensão do modelo para combustíveis com diferentes formulações e múltiplos combustíveis	38
4.	Adaptação do Modelo ao Caso Diesel-Gás	42
4.1	Definições	45
4.1.1	Índice de octanas modificado (OI').....	45
4.1.2	Razão de equivalência (ϕ).....	45
4.1.3	Fração molar dos gases inertes (X_{inerte}).....	46
4.2	Cálculo da composição n-heptano-gás natural	46
4.3	Verificação numérica da hipótese.....	48
4.4	Construção da base de dados	56
5.	Verificação Numérica do Modelo	59
5.1	Cálculo a volume constante.....	59
5.2	Análise qualitativa de uma simulação numérica	63
6.	Conclusões e Recomendações	67
7.	Referências Bibliograficas	69

Lista de Figuras

Figura 1.1 – Consumo final energético do setor de transporte por fonte para o Brasil (EPE, 2008)	15
Figura 2.1 – Zonas definidas em cada célula computacional pelo modelo ECFM3Z.....	28
Figura 2.2 – Evolução das zonas definidas pelo modelo ECFM3Z	29
Figura 3.1 – Representação da temperatura vs tempo para as diferentes configurações da auto-ignição em motores de combustão interna	33
Figura 3.2 – Variável de progresso do modelo TKI	35
Figura 4.1 – Composições de gás natural para MON = 110, 120	50
Figura 4.2 – Instante da auto-ignição para gases com MON = 110	51
Figura 4.3 – Instante da auto-ignição para gases com MON = 120	52
Figura 4.4 – Instante da auto-ignição para as misturas n-heptano-gás natural com $\varphi = 0,6$	53
Figura 4.5 – Instante da auto-ignição para as misturas n-heptano-gás natural com $\varphi = 1,0$	54
Figura 4.6 – Instante da auto-ignição para as misturas n-heptano-gás natural com $\varphi = 1,4$	55
Figura 4.7 – Mapas do instante da auto-ignição ($dT/dt _{max}$) para $\varphi = 1,0$, $X_{inerte} = 0\%$ e $Ol' = 0, 20, 40, 60, 80, 100, 120, 140$	58
Figura 5.1 – Comparação IFP-C3D – Senkin a partir das curvas da temperatura versus tempo para $Ol' = 0$, $\varphi = 1,0$ e $X_{inerte} = 0\%$	60
Figura 5.2 – Comparação IFP-C3D – Senkin a partir das curvas da temperatura versus tempo para $Ol' = 60$, $\varphi = 1,0$ e $X_{inerte} = 0\%$	61
Figura 5.3 – Comparação IFP-C3D – Senkin a partir das curvas da temperatura versus tempo para $Ol' = 120$, $\varphi = 1,0$ e $X_{inerte} = 0\%$	62
Figura 5.4 – Pressão vs ângulo do virabrequim para os casos simulados com o IFP-C3D	65
Figura 5.5 – Percentual do combustível queimado vs ângulo do virabrequim para os casos simulados com o IFP-C3D	65
Figura 5.6 – Percentual do calor total liberado vs ângulo do virabrequim para os casos simulados com o IFP-C3D	66

Lista de Tabelas

Tabela 4.1 – Formulação individual do n-heptano, gás natural e ar.....	47
Tabela 4.2 – Composição da mistura n-heptano-gás para $Ol' = 60$	47
Tabela 4.3 – Combustível equivalente para a mistura n-heptano-gás com $Ol' = 60$	47
Tabela 4.4 – Composição da mistura ar-combustível equivalente para $Ol' = 60$ e $\varphi = 0,8$	47
Tabela 4.5 – Composição final da mistura para $Ol' = 60$, $\varphi = 0,8$ e $X_{inerte} = 20\%$	48
Tabela 4.6 – Condições iniciais das simulações para verificação numérica do modelo	49
Tabela 4.7 – Composições de gás natural com $MON = 110$	49
Tabela 4.8 – Composições de gás natural com $MON = 120$	49
Tabela 4.9 – Condições iniciais das simulações para construção da base de dados do modelo.....	56
Tabela 5.1 – Condições iniciais das simulações para verificação numérica da implementação do modelo	59
Tabela 5.2 – Características de funcionamento para o motor simulado numericamente	64
Tabela 5.3 – Casos simulados	64
Tabela 5.4 – Composição do gás natural utilizado nas simulações	65

Nomenclatura

A – Zona de ar e gases residuais

AI – Auto-ignição

C – Fração do calor total da reação liberado ao início da chama-fria

c – Variável de progresso da auto-ignição

C₁₁H₁₀ – Alfa-metil naftaleno

C₁₂H₂₆ – Dodecano

C₁₆H₃₄ – n-Hexadecano

C₂H₆ – Etano

C₃H₈ – Propano

C₄H₁₀ – Butano

C₇H₁₆ – n-Heptano

C₈H₁₈ – iso-Octano

C₈H₂₀Pb – Chumbo tetraetila

CA50 – Ângulo do virabrequim onde a liberação de calor acumulada atinge 50% da total

CH – Carboxila

CH₄ – Metano

CO – Monóxido de carbono

CO₂ – Gás carbônico

DF – Chama de difusão

EGR – Recirculação dos gases de exaustão

F – Zona de combustível puro

GNV – Gás natural veicular

H₂ – Gás hidrogênio

HC – Hidrocarbonetos

HCCI – Ignição por compressão de carga homogênea

K – Parâmetro de ajuste para condições operacionais do motor

M – Zona de mistura

m_{CxHy} – Massa do combustível equivalente

m_{O₂} – Massa de gás oxigênio

MON – *Motor octane number*

N₂ – Gás nitrogênio

NO_x – Óxidos de nitrogênio
O₂ – Gás oxigênio
OH – Hidroxila
OI – Índice de octanas
OI' – Índice de octanas modificado
P – Pressão
Pd – Paládio
PF – Chama de pré-mistura
PMS – Ponto morto superior
PRF – Combustível de referência primária
Pt – Platina
Rh – Ródio
RON – *Research octane number*
S – Sensibilidade do combustível
T – Temperatura
t – Tempo
T₀ – Temperatura inicial
T_{comp15} – Temperatura da mistura para a pressão de 15 bar
T_F – Temperatura final
V – Volume
v_{ar} – Volume de ar
v_{C₂H₆} – Volume de etano
v_{C₃H₈} – Volume de propano
v_{C₄H₁₀} – Volume de butano
v_{CH₄} – Volume de metano
v_{CO₂} – Volume de gás carbônico
v_{C_xH_y} – Volume do combustível equivalente
v_{Diesel} – Volume de Diesel
v_{gás} – Volume de gás natural
v_{inerte} – Volume de gases inertes
v_{N₂} – Volume de gás nitrogênio
v_{O₂} – Volume de gás oxigênio
X_{inerte} – Fração de gases inertes

Y_C – Variável que computa a parcela do combustível disponível para ser consumida

Y_I – Variável que computa a espécie fictícia para monitoramento da chama-fria

$Y_{R,C}$ – Variável que representa a quantidade da mistura ar-combustível na célula computacional na ausência de reações químicas

Subscritos e Letras Gregas

AT – Alta temperatura

b – Gases queimados

BT – Baixa temperatura

st – Estequiometria

u – Gases não queimados

Δh – Calor da total reação

τ – Instante da máxima taxa de reação

τ_c – Tempo de reação

φ – Razão de equivalência

ω_c – Taxa de reação