

## 2. Revisão Bibliográfica

### 2.1 Motores Diesel-gás

Basicamente, os motores bicomustíveis Diesel-gás utilizam a plataforma de um motor de ignição por compressão Diesel com um sistema auxiliar responsável pelo fornecimento do gás natural; este último é considerado o combustível principal, funcionando o Diesel apenas como o piloto da ignição. Na ausência do gás, estes motores podem operar de acordo com sua concepção original.

Estratégias de mistura do gás natural ao ar ainda no coletor de admissão são mais difundidas e aceitas por serem simples e apresentarem custo reduzido. Sistemas que injetam o gás simultaneamente com o Diesel apresentam vantagens, como menores problemas relacionados à combustão e às emissões. Entretanto, pela necessidade da injeção a altas pressões e por possuírem um custo elevado, estes sistemas são menos utilizados (Miao e Milton, 2005).

As etapas iniciais do ciclo mais comum para estes motores são a admissão e rápida compressão de uma mistura ar-gás homogênea (como nos motores de ciclo Otto), seguida da injeção de Diesel em torno do ponto morto superior (PMS), cuja auto-ignição cria condições para o início da combustão da mistura em seu entorno. Por fim, uma frente de chama se propaga a partir da zona do *spray* (Hountalas e Papagiannakis, 2002). Em contraste com apenas uma centelha, como no ciclo Otto, esta zona relativamente extensa proporciona uma combustão regular por todo o volume da câmara (Cordiner et al., 2007).

Resultados experimentais indicam que para misturas ar-gás ricas e regimes severos de operação (com altas pressões e temperaturas durante a compressão) ocorrem frentes de chama a partir do cone formado pelo *spray* de Diesel (Pereira, 2006). Entretanto, mesmo com a grande resistência à detonação do gás natural, é possível que o *knock* (detonação espontânea) ocorra sob estas condições (Pereira, 2006; Cordiner et al., 2007). Ainda, composições de gás com maior incidência de hidrocarbonetos mais pesados também contribuem para a ocorrência deste fenômeno (Kubesh et al., 1992). Para que sua detonação não ocorra indesejavelmente, é preciso que a mistura ar-gás seja mantida empobrecida (Miao e Milton, 2005). Outra alternativa para evitar a detonação da mistura antes do tempo desejado é a utilização do EGR (recirculação dos gases de exaustão, do

inglês, *exhaust gas recirculation*), pois reduz a intensidade da combustão (Liu et al., 2007).

Observa-se que sob certas condições o aumento da quantidade de gás natural na câmara de combustão causa o prolongamento do tempo de auto-ignição da injeção piloto. No modo convencional, o incremento do Diesel disponível facilita a formação da mistura ar-combustível, diminuindo este tempo; processos que se seguem, como o aumento da temperatura das paredes da câmara contribuem ainda mais para esta redução. Para o caso bicomcombustível, a presença do gás causa mudanças na interação físico-química do Diesel com o ar (Liu et al., 2007). A partir das taxas de liberação do calor, é possível verificar também que o aumento da quantidade do gás resulta em combustão mais lenta (Singh et al., 2004).

Foram observadas experimentalmente por Hountalas e Papagiannakis (2002) grandes diferenças entre o mecanismo de liberação de calor do modo bicomcombustível e tradicional, havendo para o primeiro uma redução da pressão máxima e aumento do consumo específico para cargas baixas no eixo; para cargas mais altas, este consumo se aproximou do caso base. Em relação à emissão de poluentes, verificou-se que quanto maior a substituição do Diesel por gás natural, maior foi a redução nos índices de  $\text{NO}_x$  e particulados, com queda acentuada em cargas mais altas.

Estes motores não são largamente aceitos por apresentar menor eficiência térmica e índices de emissão de CO e HC mais elevados em comparação aos motores Diesel convencionais. O aumento de CO pode ser explicado pelo grande enriquecimento local da mistura durante a injeção do Diesel; já os altos índices de HC ocorrem porque à baixa carga a quantidade de gás natural admitido é reduzida e a mistura torna-se empobrecida, tornando o processo de combustão mais lento que o suficiente para que ocorra completamente (Cordiner et al., 2007). Experimentos sugerem que por certas vezes, apenas o gás no entorno do *spray* piloto de Diesel é efetivamente queimado (Pereira, 2006). Outro fator relevante é o escape do gás quando há o longo *overlap* das válvulas, especialmente acentuado na existência de um turbo compressor na admissão (Cordiner et al., 2007). Os fatores relacionados aos índices de HC justificam também a perda de eficiência térmica nesta faixa de operação (Miao e Milton, 2005).

Ao longo dos últimos anos novos estudos objetivaram soluções eficazes para a resolução dos problemas associados à emissão de poluentes dos motores Diesel-gás (Egúsqiza, 2006). O avanço e aumento de tempo de duração da injeção piloto proporciona um processo de combustão mais regular, com ganhos de eficiência e diminuição na produção de HC e CO; em contrapartida, esta solução aumenta os índices de particulados e NO<sub>x</sub> (Cordiner et al., 2007).

Outras possíveis estratégias são o aquecimento prévio da mistura ar-gás e a restrição parcial do ar admitido. A primeira reduz o percentual de gás não queimado, mas pode resultar em *knock* e conseqüente redução de eficiência em cargas mais elevadas. A segunda traz efeitos benéficos ao enriquecer a mistura ar-gás que em conjunto com o seu aquecimento pode ser particularmente eficiente (Egúsqiza, 2006). Não obstante, a restrição do ar pode resultar também em aumento de particulados, NO<sub>x</sub> e CO (Cordiner et al., 2007).

A utilização do EGR origina resultados positivos no controle de HC, CO e NO<sub>x</sub>, ao mesmo tempo em que aumenta a eficiência térmica (Cordiner et al., 2007). Este método promove a diluição do ar com gases inertes provenientes da recirculação da exaustão de ciclos anteriores; a diminuição do ar resulta em atrasos na ignição, liberação do calor mais lenta e conseqüente diminuição nos picos de pressão. A diminuição do NO<sub>x</sub> é proporcionada pela diminuição das temperaturas no interior da câmara; isto ocorre porque estes gases possuem calor específico maior do que o ar puro, absorvendo uma parte maior do calor da combustão. Por fim, o HC remanescente de queimas incompletas em cargas baixas também é recirculado, o que aumentando a probabilidade de sua combustão total (Egúsqiza, 2006).

O pós-tratamento dos gases de escape através de catalisadores (ou conversores catalíticos) tem o objetivo de neutralizar os compostos considerados nocivos (NO<sub>x</sub>, CO e HC), transformando-os em gases inofensivos presentes normalmente na atmosfera. Esta estratégia não interfere no processo de combustão e é considerada uma alternativa de custo mais elevado. Comumente, estes equipamentos são constituídos por colméias, objetivando o aumento da área de contato dos gases com os catalisadores. A parte responsável pela oxidação dos HC e CO é normalmente constituída de platina (Pt) e paládio (Pd); para a realização da redução do NO<sub>x</sub> em oxigênio (O<sub>2</sub>) e nitrogênio (N<sub>2</sub>), utiliza-se ródio (Rh) e novamente Pt.

## 2.2 Simulação numérica Diesel-gás

A literatura indica que diversos esforços foram concentrados na modelagem e simulação de motores Diesel-gás, demonstrando a importância de um suporte analítico ao seu desenvolvimento.

Em seu trabalho, Hountalas et al. (2002) propõem um modelo para a simulação da combustão Diesel-gás em motores bicomustíveis, com o objetivo de prever não só a potência e a eficiência, mas também as emissões de particulados e  $\text{NO}_x$ . Os autores realizaram a validação do modelo através da comparação das simulações numéricas com resultados experimentais obtidos para um motor de testes Diesel monocilíndrico com pequenas adaptações e injeção do gás natural no coletor de admissão. Foram experimentados diversos percentuais de substituição do Diesel com diferentes cargas no eixo para uma mesma velocidade de rotação. O modelo da combustão proposto considera duas zonas, uma com gases ainda não queimados e outra onde ocorre a queima; assume-se que a ignição da mistura ocorre apenas após a auto-ignição do Diesel, calculada por uma correlação empírica em função da razão de equivalência, temperatura e pressão da mistura. O dodecano ( $\text{C}_{12}\text{H}_{26}$ ) foi utilizado para representar o Diesel, enquanto que apenas uma composição fixa de gás natural com 98% de metano ( $\text{CH}_4$ ) foi considerada. A comparação dos resultados teóricos e experimentais se deu em termos da pressão, taxa de liberação de calor, consumo específico de combustível, emissões de  $\text{NO}_x$  e particulados. A análise revelou resultados positivos para as condições operacionais testadas.

Posteriormente, Singh et al. (2004) relatam em seu estudo a implementação de melhorias e validação experimental de um modelo desenvolvido anteriormente por um dos autores. O código desenvolvido é baseado no KIVA-3V e conta com sub-modelos para *spray*, emissões e combustão. Pressupõe-se que a combustão também é iniciada pela auto-ignição do Diesel, a qual é contabilizada pelo modelo Shell (modelo desenvolvido por Halstead et al., 1977, para auto-ignição de hidrocarbonetos a altas pressões e temperaturas baseado em um mecanismo com 10 espécies, 8 reações químicas e coeficientes obtidos de experimentos). Apenas uma condição operacional, turbo-alimentada e à plena carga foi simulada; variou-se o percentual de substituição em termos energéticos de Diesel por gás de 0 a 95%. Verificou-se que o modelo previu corretamente os processos de auto-ignição e combustão, com exceção dos casos com grande quantidade de gás natural.

Acredita-se que o modelo originalmente desenvolvido para Diesel não consegue reproduzir a propagação mais lenta da chama pela mistura ar-gás natural.

Cordiner et al. (2007) desenvolveram uma abordagem 1D-3D para as simulações. O código 0D-1D calculava o funcionamento completo do motor e fornecia como resultado as condições de contorno para a simulação multidimensional da câmara de combustão, também baseada no código KIVA-3V. Da mesma forma que Hountalas et al. (2002) e Singh et al. (2004), a ignição do Diesel é considerada como a responsável pelo início da combustão; no entanto, a energia liberada por sua queima é negligenciada. Assim como Singh et al. (2004), a auto-ignição é também contabilizada pelo modelo Shell. Foi estudado apenas um único caso, relativo a um motor Diesel pesado convertido para o modo bicomustível, sob um único regime de operação. Enfoque foi dado ao estudo do escoamento, e a comparação com dados experimentais revelou-se positiva.

### 2.3 IFP-C3D

IFP-C3D é a denominação para o código computacional desenvolvido nos últimos anos pelo IFP destinado exclusivamente à simulação numérica de escoamentos internos reativos e compressíveis com presença de *spray* e combustão. Sua aplicação principal é a simulação de motores de combustão interna a partir da solução das equações de Navier-Stokes pelo método da integração espacial de volumes finitos (Bohbot et al., 2009).

A discretização 3D do espaço euclidiano é realizada através da definição de malhas não-estruturadas (padrões irregulares) com elementos hexaédricos (6 faces e 8 vértices); as grandezas escalares (temperatura, pressão, etc.) e vetoriais (velocidades, etc.) são computadas respectivamente no centro e nos vértices das células. A utilização deste tipo de malha permite melhor reproduzir geometrias complexas como, por exemplo, superfícies curvas. Outra vantagem é a possibilidade do refinamento da malha (aumento do número de células computacionais) somente em zonas onde é esperada a presença de gradientes elevados. Isto permite soluções numéricas mais precisas sem a necessidade do refinamento total da malha, o que diminui sensivelmente o custo computacional das simulações. Por fim, algoritmos para renumeração dos nós na malha são empregados visando à redução da banda das matrizes de conectividade (remoção

dos elementos nulos das proximidades da diagonal principal), o que também reduz consideravelmente o tempo de computação.

A solução numérica é obtida através da resolução das equações de conservação de massa e da quantidade de movimento, energia interna e turbulência. Para tal utiliza-se a formulação ALE (Lagrangeana-Euleriana Arbitrária, do inglês, *Arbitrary Lagrangean Eulerian*), que procura combinar as vantagens e minimizar as desvantagens das abordagens lagrangeana e euleriana (Bohbot et al., 2009). Na primeira, os nós da malha computacional deslocam-se em conjunto com as partículas em movimento, o que por um lado facilita a definição de superfícies e interfaces entre diferentes fluidos, mas por outro não permite a computação de grandes distorções da malha sem a sua redefinição. A segunda é largamente utilizada em mecânica dos fluidos e permite lidar com grandes distorções do meio contínuo, ao custo de requerer definições precisas das interfaces. Pela abordagem ALE é possível contabilizar as geometrias móveis (válvulas e pistão) e as grandes variações de volume da câmara de combustão de maneira mais eficiente que pela lagrangeana e com maior precisão do que a permitida pela euleriana.

O cálculo em cada intervalo de tempo da simulação se dá em três estágios. No primeiro, os termos de fonte das reações químicas da mistura (auto-ignição, combustão, pós-oxidação, dentre outros) são computados e adicionados às equações de conservação. Em seguida, as equações são resolvidas para o intervalo de tempo em questão. Finalmente, as soluções locais são transferidas para as novas posições calculadas a partir da movimentação da malha (Bohbot et al., 2009).

A combustão pode ser contabilizada por dois sub-modelos implementados no código. O ECFM (*Extended Coherent Flame Model*) é adequado para motores onde o mecanismo de oxidação é representado predominantemente pela chama de pré-mistura (por exemplo, motores a gasolina). Este presume que a queima ocorre em uma fina camada, que por sua vez separa as zonas da mistura ar-combustível onde a oxidação já ocorreu (gases queimados) e onde está por ocorrer (gases não queimados); a direção de propagação da chama se dá da primeira para a última. A composição local da mistura e a correta temperatura dos gases não queimados são calculados em cada instante e posição da câmara, o que permite definir com melhor precisão as velocidades de propagação da chama. Este modelo funciona

em conjunto com outros responsáveis por computar a ignição, como o AKTIM (*Ark Kernel Tracking Ignition Model*), que reproduz o funcionamento das velas de ignição; a operação com sub-modelos que calculam a auto-ignição (para previsão do *knock*) também é possível (Colin et al., 2003).

A generalização do modelo ECFM foi obtida através do ECFM3Z (*3-Zones Extended Coherent Flame Model*), o qual busca reproduzir não somente o mecanismo da chama de pré-mistura, mas também a combustão por difusão. Estes são os modos elementares presentes nos motores a Diesel, mas a extensão deste modelo a outros casos pode ser feita (Bohbot et al., 2009).

Colin e Benkenida (2004) descrevem o modelo ECFM3Z em mais detalhes. Cada célula computacional é dividida em três zonas, sendo uma contendo combustível puro ( $F$ ), outra com ar e gases residuais da combustão ( $A$ ) e a terceira com a mistura destes ( $M$ ). A representação esquemática destas zonas pode ser visualizada na Figura 2.1. Por razões elementares, supõe-se que a combustão ocorre apenas na zona  $M$ .

Assim como no modelo ECFM, considera-se que durante a combustão os gases da região  $M$  possam já ter sido queimados (sobrescrito  $b$ ) ou não (sobrescrito  $u$ ). A quantidade de gases em cada estado na zona  $M$  é definida por uma variável que armazena o progresso da combustão, a qual possui valor nulo ao início e unitário quando a mistura presente nesta zona foi consumida por completo. Considera-se que em todas as zonas, exceto na região  $M^b$ , a temperatura é homogênea e atualizada em função do calor liberado até o momento em questão. Apesar dos sobrescritos, as regiões  $A^b$  e  $F^b$  não contém respectivamente ar e combustível queimados; estas indicam apenas as parcelas que irão se misturar posteriormente na zona  $M^b$ , não havendo quaisquer diferenças em relação às zonas  $A^u$  e  $F^u$ .

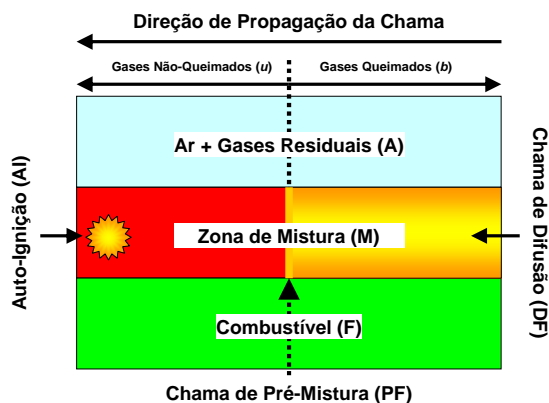


Figura 2.1 – Zonas definidas em cada célula computacional pelo modelo ECFM3Z

Ao início de um ciclo Diesel, a câmara de combustão contém apenas ar e gases residuais de ciclos anteriores (caso haja a recirculação da exaustão), correspondendo à região  $A^u$ . Durante a injeção, a evaporação das gotas do *spray* adiciona o combustível à sua respectiva zona  $F^u$ ; neste estágio, ainda não se considera a ocorrência da mistura entre o ar e o fluido injetado, estando a zona de mistura  $M$  vazia. À medida que a mistura ocorre, parcelas de combustível e ar presentes são deslocadas de suas respectivas zonas para a região  $M^u$ ; desde o primeiro momento da formação desta, o tempo para auto-ignição da mistura em questão passa a ser computado. O processo no caso dos motores a gasolina é essencialmente o mesmo, diferindo apenas no fato da zona  $M$  poder não estar vazia ao início do ciclo (devido à pré-mistura do ar ao combustível ainda no coletor de admissão).

Quando a ignição (AI) ocorre, seja pela auto-ignição ou pela presença de centelha, a mistura na zona  $M$  é rapidamente consumida, e a propagação da chama de pré-mistura (PF) causa a transferência dos gases da região  $M^u$  para a  $M^b$ . Nesta última zona são então computadas as formações de  $\text{NO}_x$ , particulados e  $\text{CO}$ ; tais cálculos são efetuados por sub-modelos específicos, sendo importantes para estimar corretamente a temperatura desta região ao longo do ciclo.

É possível que, mesmo após o início da combustão, o ar e combustível restantes em suas respectivas zonas sejam representativos e continuem a migrar para a região  $M$ . Considera-se então que a parte dos gases restantes, presentes em  $A^b$  e  $F^b$ , se misturam com os gases queimados em  $M^b$  e são consumidos pela cinética do pós-chama. Neste caso, a combustão é controlada pela velocidade em que ocorre mistura (chama de difusão, DF), dado que esta é normalmente muito



inferior às velocidades de reação. As outras parcelas restantes, encontradas em  $A''$  e  $F''$ , são transferidas para a zona  $M''$ , sendo consumidas pela chama de pré-mistura. Este processo é representado na Figura 2.2.

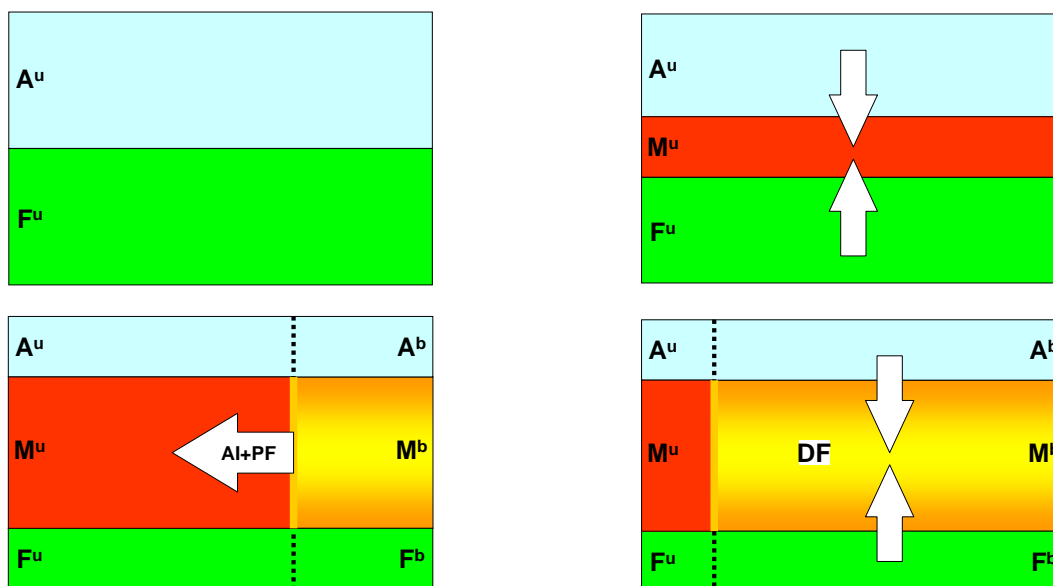


Figura 2.2 – Evolução das zonas definidas pelo modelo ECFM3Z

A ocorrência da auto-ignição na zona de mistura  $M$  pode ser prevista de diversas formas. As abordagens mais comuns presentes na literatura lançam mão de correlações empíricas para o cálculo deste intervalo de tempo. Outras prevêm a utilização de esquemas de reações químicas, sejam estas simplificadas ou não. O IFP-C3D utiliza para a combustão do Diesel uma modelagem baseada em taxas de reação tabuladas a partir de simulações numéricas previamente realizadas para inúmeras condições iniciais. Por ser o foco principal deste trabalho, esta modelagem será detalhada mais adiante, no capítulo 3.