



INVESTIGAÇÃO NUMÉRICA DE PARÂMETROS DE DESEMPENHO E EMISSÕES EM MOTOR OPERANDO COM GÁS DE SÍNTESE.

Guilherme Yago Zulian, guilherme.zulian@gmail.com¹

Charles Rech, charles.rech@ufsm.br²

Lucas Manique Raymundo, lucas.raymundo@senairs.org.br³

Paulo Rodolfo Buffon Ortiz, paulo.ortiz@senairs.org.br³

¹Universidade Federal de Santa Maria, Camobi, Santa Maria, Av. Roraima número 1000 – Prédio 09-D.

²Universidade Federal de Santa Maria, Campus Cachoeira do Sul Rodovia Taufik Germano, 3013 - Passo D'Areia - CEP 96503-205, Cachoeira do Sul/RS – Brasil

³Instituto SENAI de Tecnologia em Petróleo, Gás e Energia, Av. Presidente Vargas, 3023 - Centro - CEP 93260-006, Esteio/RS – Brasil

Resumo. Tendo em vista a crescente pesquisa em alternativas para motores de combustão interna que sejam mais eficientes e menos poluentes, há um extenso leque de opções de combustíveis alternativos que possam substituir total ou parcialmente os combustíveis convencionais. Combustíveis gasosos vem sendo cada vez mais estudados devido a sua densidade energética e suas emissões de gases de efeito estufa e gases poluentes. Com isso, esse trabalho visou a análise comparativa de dois gases: Gás Natural Veicular (GNV) e Gás de Síntese proveniente da queima de materiais têxteis em software de simulação unidimensional, efetuando a construção de um modelo computacional de um motor monocilíndrico Honda GX35, seguido pela simulação variando Lambda em uma rotação fixa de 1800 rpm, visando uma utilização desses combustíveis em geradores. Através dessa análise, foi possível alcançar maiores potências de eixo e maiores eficiências de eixo em operações com gás de síntese, embora maiores emissões específicas de NO. A potência alcançada de eixo foi aproximadamente 45% superior ao GNV, mesmo com uma densidade energética inferior do gás de síntese, enquanto teve um ganho de quase 2 percentuais em eficiência de eixo, operando com relação ar/combustível estequiométrica.

Palavras chave: Combustíveis Renováveis, Eficiência Energética, Injeção Direta.

Abstract. In view of the increasing research for alternatives to internal combustion engines that are more efficient and less polluting, there is a wide range of alternative fuel options that can fully or partially replace conventional fuels. Gaseous fuels have been increasingly studied due to their energy density and their emissions of greenhouse gases and polluting gases. Thus, this work aimed at the comparative analysis of two gases: Vehicular Natural Gas (VNG) and Synthesis Gas from the burning of textile materials in one-dimensional gas simulation software, carrying out the construction of a computational model of a Honda GX35 single-cylinder engine, followed by the simulation varying Lambda in a fixed rotation of 1800 rpm, aiming at the use of these fuels in generators. Through this analysis, it was possible to achieve higher brake powers and higher brake efficiencies in syngas operations, although higher specific emissions of NO. It was possible to achieve a brake power approximately 45% higher than VNG, even with a lower energy density of the syngas, while having a gain of almost 2 percentages in brake efficiency, operating with stoichiometric air/fuel ratio.

Keywords: Renewable Fuels, Energy Efficiency, Direct Injection.

1. INTRODUÇÃO

Os motores de combustão interna (MCIs) são considerados um dos maiores responsáveis pela poluição ambiental, causada pelas suas emissões, além de serem responsáveis por diversos problemas de saúde (Reşitoğlu, Altinişik, and Keskin 2015). Principalmente em função das emissões de Óxidos de Nitrogênio (NO_x) que são o foco principal das pesquisas em controle de emissões, especialmente em motores ciclo diesel, largamente utilizados em geradores elétricos. O controle dessas emissões é mais complexo e requer a implementação de novas tecnologias, que envolvem o gerenciamento de ar, controle de injeção de combustível, pós-tratamento e integração de sistemas (International Council on Clean Transportation 2012). Levando em consideração as crescentes restrições nos limites de emissões, espera-se que seja criada uma legislação para emissões de geradores e motores estacionários. Dentro desse contexto, tem sido largamente estudado o aumento da eficiência energética desses motores, bem como a substituição de combustíveis fósseis, como diesel, por combustíveis renováveis ou combustíveis gasosos, como gás metano ou gás de síntese. Esses gases, e sua composição, vem sendo amplamente explorados por pesquisadores da área de engenharia de motores, e vem mostrando possibilidades de alcançar maior eficiência energética e menores emissões de poluentes (Orbaiz et al. 2013) (Zuccari et al. 2015).

Contudo, existem algumas restrições na sua aplicação no mercado, uma vez que, por se tratar de um gás, encontra-se determinados como desafios físicos para o motor, bem como desafios físico-químicos para a sua combustão (Shivapuji and Dasappa 2015). A aplicação desse tipo de estratégia em geradores de potência também tem sido fonte de pesquisa (Elishav et al. 2020), bem como a utilização de gás de síntese com diferentes composições em diversos motores com aplicações distintas (Long et al. 2021, Orbaiz and Brear 2014). Com base nisso, esse trabalho busca investigar parâmetros de emissões e performance de uma determinada composição de gás de síntese em um motor monocilíndrico Honda GX35 em software de simulação de gases 1D, operando em uma rotação fixa de 1800 rpm.

2. METODOLOGIA

A metodologia para desenvolvimento das simulações partiu do experimento, definindo a composição do gás e o método comparativo a ser utilizado. Aquisição de dados experimentais do setup como dados geométricos do motor e regimes de operação são fundamentais para a construção do modelo computacional.

Partindo dessas informações de experimento, a metodologia de modelagem seguiu os tutoriais do próprio software tendo como adendo a construção de um modelo de detonação *standard*, que parte apenas do número de octanas do combustível. A abordagem adotada para a octanagem do combustível foi a *Anti-Knock Index* (AKI) que é definida à partir da média entre *Motor Research Number* (MON) e *Research Octane Number* (RON). Esse modelo de detonação foi utilizado para que se pudesse definir limites de operação dessa estratégia. A octanagem do combustível, ou Methane Number (MN) como é chamada a resistência a detonação para gases, foi definida conforme Boggio et al., 2017 e utilizou-se a definição da AVL MN, largamente utilizada na indústria. Definiu-se, a partir daí, um MN para o gás de síntese de 88.

O método comparativo entre os gases partiu da ideia de comparar o gás de síntese com um gás comercial, enfrentando os mesmos desafios que são encontrados para operação em MCI's com qualquer combustível gasoso. Daí, definiu-se gás natural veicular (GNV) como comparativo ao gás de síntese. Para o GNV, utilizou-se a mesma estratégia utilizada para o gás de síntese e, à partir disso, encontrou-se um MN de 90 para o GNV.

Dados como duração de combustão de gás de síntese e de GNV foram encontrados (Xu and LaPointe 2016) e utilizados na simulação. Enquanto que o ângulo de 50% de massa queimada (CA50) foi ajustado para ambos os combustíveis para que estes não estivessem em regime de detonação, em plena carga.

As simulações partiram do pressuposto de operar em uma rotação fixa de 1800 rpm buscando máxima potência de eixo, com ambos os combustíveis, sem detonação. Com isso, pode-se comparar parâmetros de desempenho, como eficiências e pressão média efetiva, e parâmetros de emissões, como emissões de NO_x. Além disso, variou-se o fator de excesso de ar (λ) de 1,0 até 1,2, variando de 0,1 em 0,1. A potência de eixo, calculada conforme Equação 1 foi o parâmetro a ser maximizado na simulação, buscando uma maior eficiência energética e possível redução de emissões específicas de eixo.

$$P_{Brake} = \dot{m}_{fuel} * Q_{LHV} * \eta_{f,b} \quad (1)$$

em que \dot{m}_{fuel} é a vazão mássica de combustível, Q_{LHV} é o poder calorífico inferior do combustível e $\eta_{f,b}$ a eficiência de conversão de combustível de eixo do motor.

A Tabela 1, construída a partir de The Engineering Toolbox, 2017, apresenta a composição dos combustíveis utilizados nesse trabalho. Ambos os combustíveis foram construídos dentro de templates do *software* como *FluidMixture*, estratégia que permite que se defina a composição do combustível à partir de espécies incluídas nas bibliotecas da ferramenta.

Tabela 1 - Composição Mássica dos gases

Gás de Síntese				
Elemento		Densidades [kg/m ³]	Composição Mássica [%]	Poder Calorífico Infeior (Q_{LHV}) [MJ/kg]
Nitrogênio	N ₂	1,165	64,50	--
Monóxido de Carbono	CO	1,165	21,40	10,01
Dióxido de Carbono	CO ₂	1,842	13,00	--
Hidrogênio	H ₂	0,090	0,70	119,94
Metano	CH ₄	0,668	0,40	50,00
Total		1,243	100,00	3,18
GNV				
Elemento		Densidades [kg/m ³]	Composição Mássica [%]	Poder Calorífico Infeior (Q_{LHV}) [MJ/kg]
Metano	CH ₄	0,668	77,86	50,00
Etano	C ₂ H ₆	1,264	10,32	47,52
Propano	C ₃ H ₈	1,882	5,45	46,35
Dióxido de Carbono	CO ₂	1,842	4,37	--
Nitrogênio	N ₂	1,165	1,99	--
Total		0,857	100,00	46,36

A Tabela 2 apresenta dados de consumo do motor, para GNV e Gás de Síntese. Esse dados foram utilizados para embasar argumentos das discussões acerca dos resultados apresentados na seção 3 desse trabalho.

Uma massa de combustível real com o gás de síntese foi calculada, onde as massas de elementos (gases) inertes que fazem parte do combustível (como N_2 e CO_2) foram removidas da massa total do combustível, podendo assim calcular uma razão A/F real.

Tabela 2 - Dados de consumo do motor

Combustível	Lambda	Razão A/F REAL	m_{comb} [g/ciclo]	\dot{m}_{comb} (injetor) [g/s]	\dot{m}_{comb} REAL [g/ciclo]	m_{ar} [g/ciclo]	\dot{m}_{ar} (intake) [g/s]	ρ_{comb} [g/m ³]
GNV	1	17,037	0,0020	0,0299	0,0019	0,0318	0,4763	857
	1,1	18,662	0,0018	0,0273	0,0018	0,0318	0,4768	
	1,2	20,467	0,0017	0,0249	0,0016	0,0318	0,4773	
Syngas	1	3,728	0,0380	0,5702	0,0086	0,0319	0,4783	1243
	1,1	4,495	0,0316	0,4733	0,0071	0,0319	0,4787	
	1,2	5,288	0,0268	0,4026	0,0060	0,0319	0,4790	

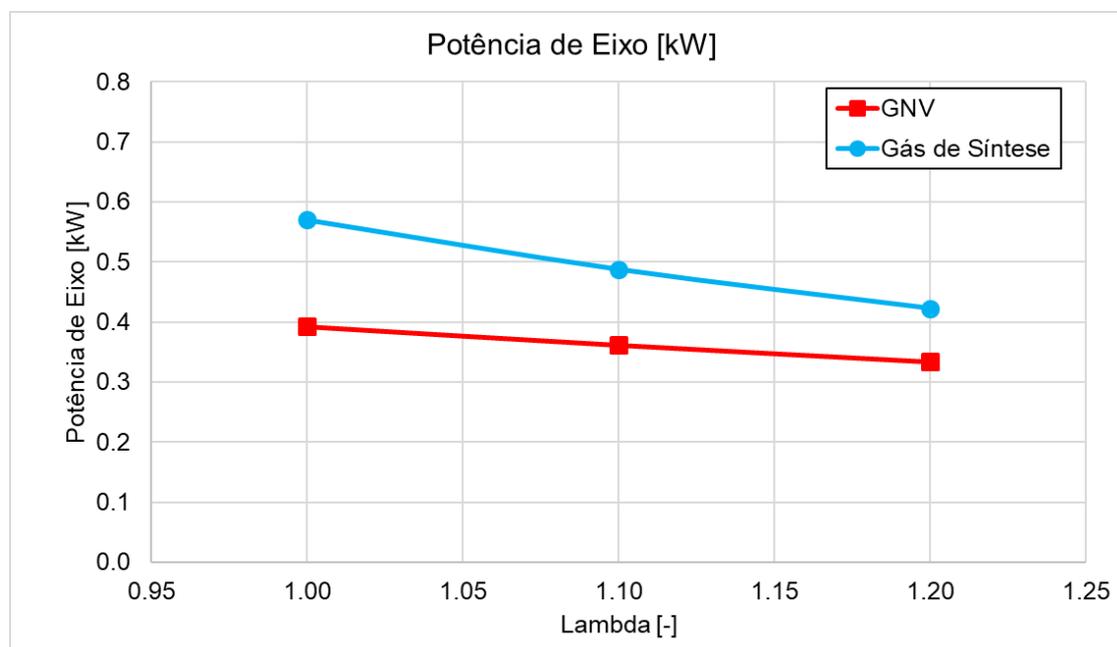
Os dados adquiridos após a simulação no modelo validado foram *plotados* com o fator de relação ar/combustível (lambda) no eixo x, para melhor visualização da variação de parâmetros com o empobrecimento da mistura, para ambos os combustíveis.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com o objetivo de alcançar máximo ganho de potência em operação com gás de síntese em comparação com GNV, sem detonação e sem perdas de eficiência, foi realizada uma simulação em *software* de gases unidimensional.

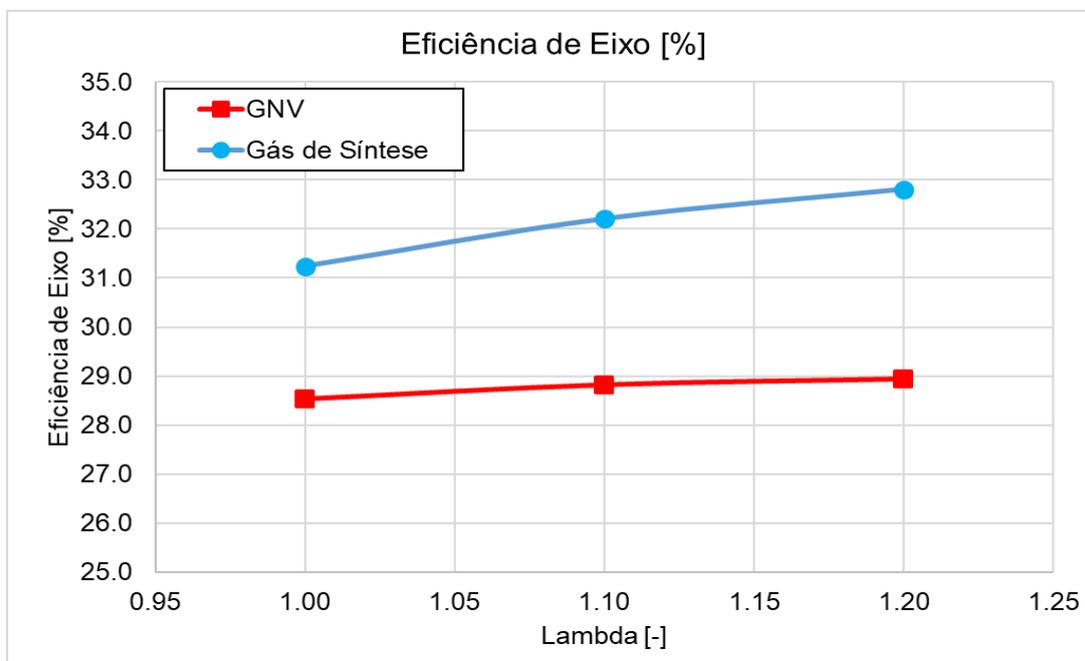
Na Figura 1, é apresentada a potência de eixo (*Brake*), em quilowatts (kW). Houve uma tendência, com o empobrecimento da mistura (aumento do excesso de ar), de redução da potência de eixo, como esperado. Um resultado importante foi a maior potência alcançada com o gás de síntese comparativamente com o GNV. Uma explicação para esse resultado se dá partindo da equação 1. A vazão mássica de combustível do gás de síntese foi expressivamente maior (Tabela 2) devido à menor disponibilidade de combustível por unidade de massa na composição química. O outro termo da equação, a eficiência de eixo, que pode ser visto na Figura 2, foi maior para o gás de síntese.

Figura 1 - Potência de Eixo vs Relação Ar/Combustível (Lambda)



A partir da Tabela 2, pode-se ver que a massa de combustível real admitida por ciclo com gás de síntese é maior, para uma mesma massa de ar por ciclo. Isso pode ser justificado pela razão ar/combustível (A/F), que é muito menor com o gás de síntese. Outro fator que favorece o alcance de maiores potências com o gás de síntese é a maior densidade do gás, fazendo com que seja possível admitir mais combustível em um mesmo volume e ainda com maior disponibilidade de oxigênio na composição do combustível.

Figura 2 - Eficiência de Eixo vs Relação Ar/Combustível (Lambda)



A eficiência de eixo pode ser vista como uma medida da quantidade da energia contida no combustível que o motor é capaz de transformar em trabalho de eixo. A eficiência de eixo alcançada com o gás de síntese foi maior quando comparada ao GNV. A eficiência de eixo pode ser explicada pela temperatura e pressão dentro do cilindro durante a combustão. A pressão operando com gás de síntese foram maiores, o que pode ser explicado pela maior quantidade de combustível injetado, como é mostrado na Tabela 2, que apresenta a vazão mássica de combustível. A maior pressão também é uma importante justificativa para a maior potência de eixo, uma vez que a potência pode ser definida como o trabalho dividido pelo tempo, e o trabalho pode ser definido como a integral cíclica de pressão pelo diferencial de volume.

A eficiência de eixo é também uma justificativa para a maior potência de eixo encontrada com o gás de síntese. As Figuras 3 e 4 apresentam a temperatura e pressão máximas do cilindro para operação com GNV e Gás de Síntese.

Figura 3 - Pressão máxima de cilindro para os 2 gases simulados.

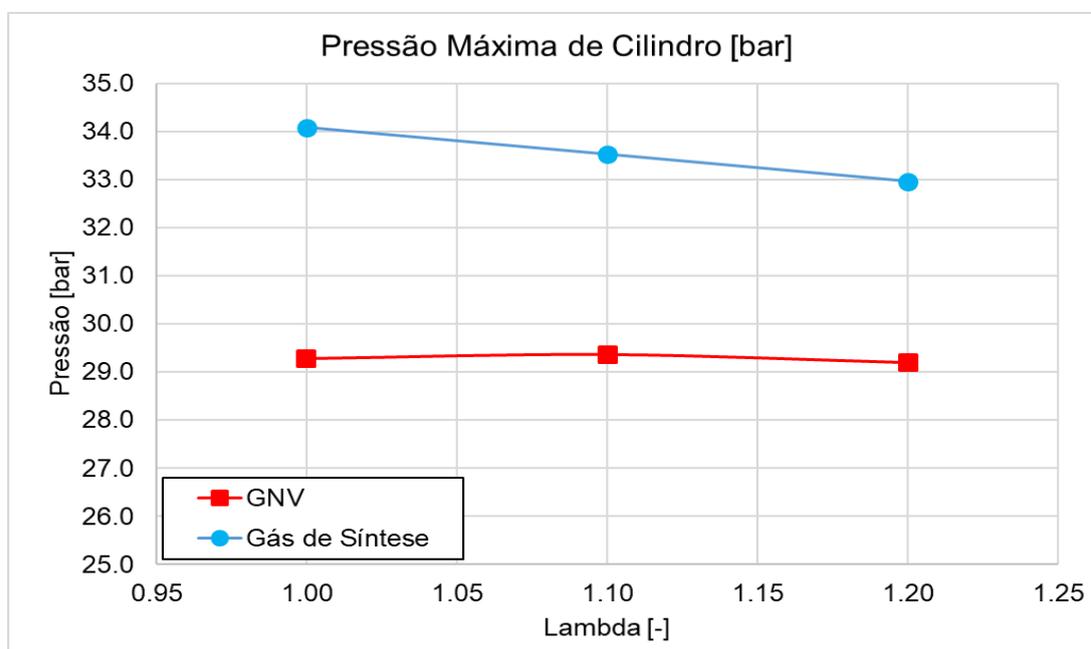
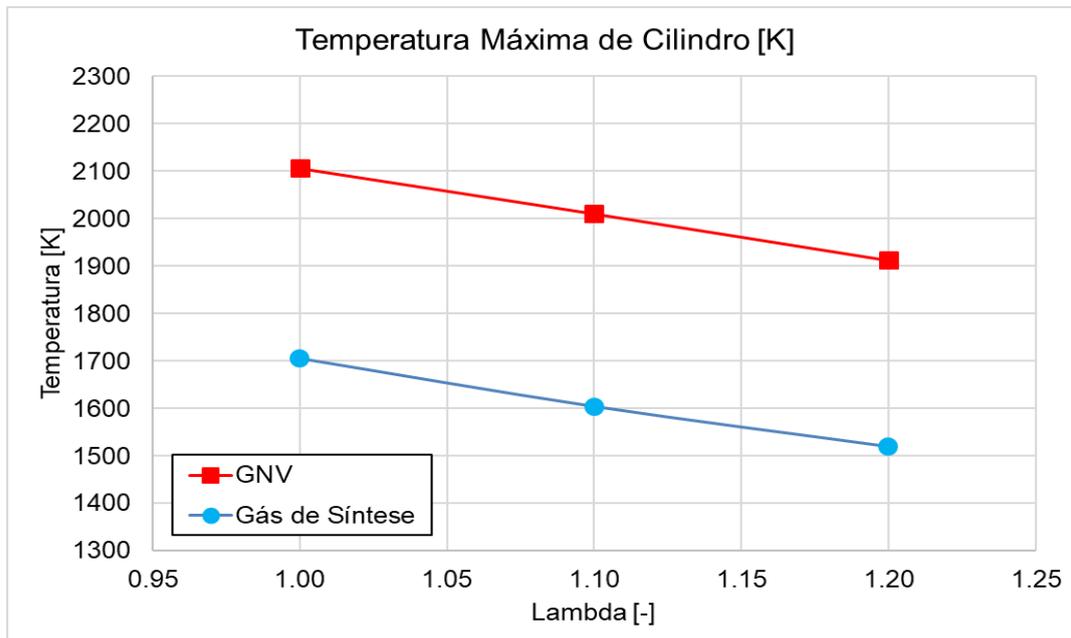


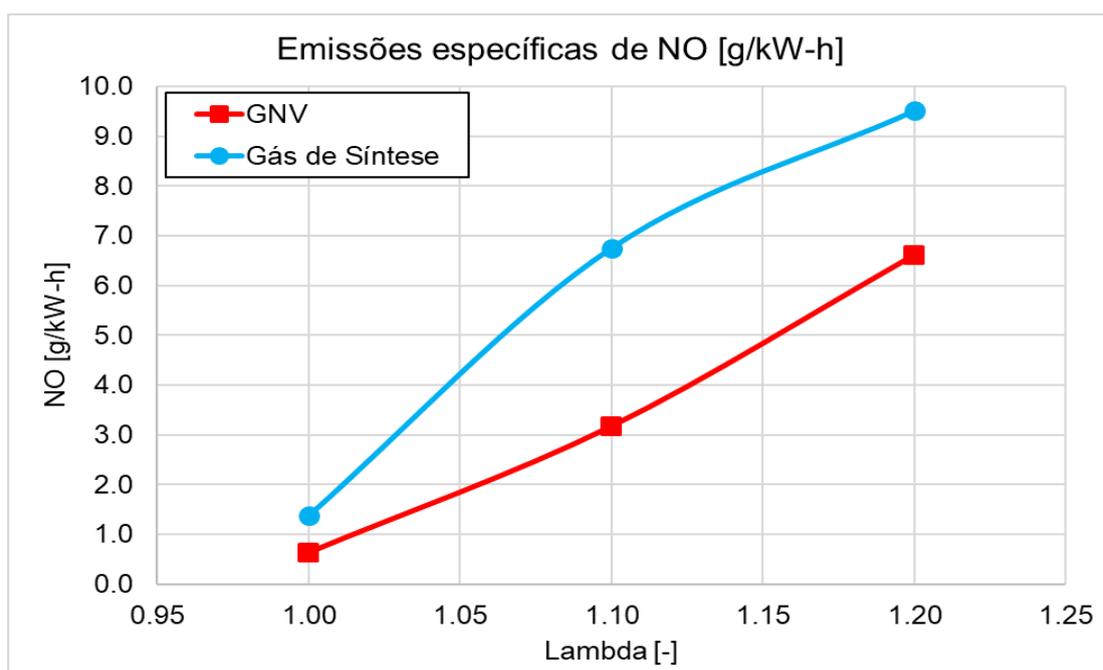
Figura 4 - Temperatura máxima no cilindro



A maior pressão máxima de cilindro com o gás de síntese pode ser justificada pela maior quantidade de combustível injetada com esse gás, e justifica a maior potência de eixo. Contudo, menores temperaturas máximas de cilindro foram alcançadas com o gás de síntese, o que pode ser explicado pela maior quantidade de gases inertes na composição desse combustível e consequentemente na câmara de combustão, o que pode configurar uma diminuição da reatividade da mistura a ser queimada.

As emissões de NO foram maiores operando com gás de síntese, como é mostrado na Figura 5. A justificativa para isso está na composição dos gases, enquanto o GNV tem um percentual de menos de 2% de nitrogênio, o Gás de Síntese se aproxima de 65% de nitrogênio, conforme mostra a Tabela 1. A maior disponibilidade de nitrogênio proporciona a formação dos compostos NO e NO₂, a partir da junção com as moléculas de Oxigênio presentes na mistura.

Figura 5 - Emissões específicas de NO (Brake) vs Relação Ar/Combustível (Lambda)



Outro importante fator na formação de NO, é a temperatura de combustão, devido a maior quantidade de energia disponível, bem como o *phasing* de combustão (ângulo de 50% de massa queimada (CA50)). As emissões de NO são regidas no *software* principalmente pelo mecanismo de *Extended Zeldovich*, que tem como principal fator a temperatura

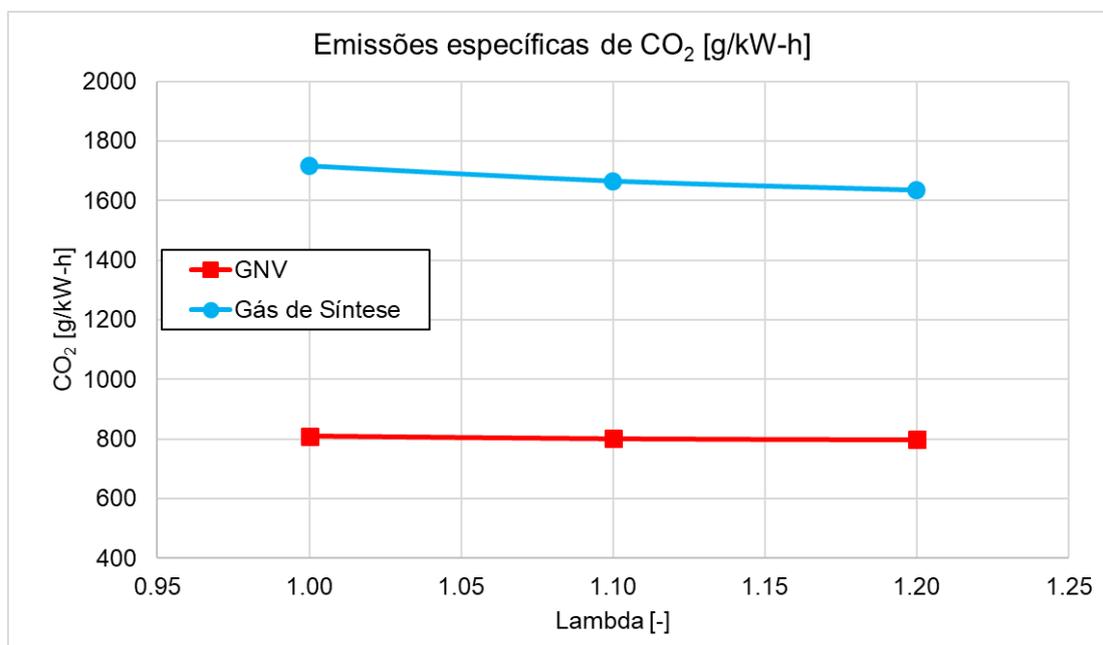
de massa queimada, tendo como *trade-off* uma temperatura de 1800 K. Essa temperatura não foi alcançada operando com gás de síntese. Logo, as emissões de NO estão estritamente ligadas a composição do combustível.

Na Figura 6 são apresentadas as emissões específicas de CO₂. As emissões específicas de CO₂ foram maiores com o Gás de Síntese, mesmo ele tendo uma maior saída de potência de eixo. Isso decorre da larga presença de CO e CO₂ na composição do gás, que pode ser visto na tabela 1, além de uma menor presença de átomos de hidrogênio, que durante a combustão reagiriam com o Oxigênio formando água. Há uma grande quantidade de combustível admitido na operação com Gás de Síntese, tendo aproximadamente 3,7 do volume do cilindro ocupado pelo Gás, que é composto por uma boa parcela de CO₂ e N₂. Para uma operação estequiométrica, o gás de síntese tem aproximadamente 23% do seu volume ocupado apenas por CO₂ e N₂.

Há uma quantidade importante de CO₂ na composição do gás de síntese, bem como uma maior vazão de combustível. O CO₂ contido no gás de síntese entra no cilindro e sai sem participar da combustão, enquanto que uma pequena parcela ainda se forma dentro do cilindro devido as altas temperaturas de combustão com gás de síntese. O dióxido de carbono não é um gás tóxico e pode ser facilmente tratado com um catalisados de três vias (TWC).

Para o cálculo das emissões específicas, é importante lembrar que as vazões mássicas de ar e de combustível fazem parte do equacionamento, bem como a potência de eixo. Esse fato pode ser uma justificativa para a operação com gás de síntese ter maiores emissões de eixo: conforme mostrado na Tabela 2, há maiores vazões mássicas com o gás de síntese, devido à sua densidade e a razão A/F do combustível.

Figura 6 - Emissões específicas de CO₂ (Brake) vs Relação Ar/Combustível (Lambda)



4. CONCLUSÃO

Uma modelagem para simulação unidimensional de dinâmica de gases foi realizada em software comercial, seguido pelo comparativo, em um mesmo modelo com motor operando em plena carga, de dois combustíveis gasosos: GNV e Gás de Síntese, analisando performance e emissões. Com isso, as principais conclusões acerca desse trabalho são:

- O gás de síntese, embora tenha uma menor densidade energética, alcançou maiores potências de eixo quando comparado ao GNV, chegando a alcançar 45% a mais de potência operando em lambda 1;
- O gás de síntese opera com maiores eficiências de eixo quando comparado ao GNV;
- As emissões de NO podem ser um problema do gás de síntese, que alcançou maiores índices de emissões específicas de NO;
- As emissões de CO₂ foram maiores com gás de síntese, o que não é um grande problema, uma vez que a melhor condição de operação com esse gás foi em regime estequiométrico, o que propicia o uso de catalisador de 3 vias (TWC).

O gás de síntese se mostrou um combustível em potencial para aumento da eficiência energética e, até mesmo, para frentes visando *racing*, uma vez que com ele foi possível alcançar maiores potências de eixo.

As emissões não foram o grande resultado positivo desse trabalho, mas a operação em regime estequiométrico pode ser a solução para esse problema. Ademais, boa parte do CO₂ contido nas emissões do gás de síntese, são provenientes do próprio combustível, e não do processo de combustão.

Faz-se necessário para o futuro, a análise em diferentes condições de operação, como regimes com lambda mais rico, onde pode-se ter maiores potenciais com gás de síntese.

5. REFERÊNCIAS

- Boggio, Santiago Daniel Martinez, Pedro Texeira Lacava, Maycon Ferreira Silva, Maria Esther Sbampato, Leila Ribeiro Santos, Alexander Peñaranda, and Pedro Luiz Curto Risso. 2017. "Flame Propagation Study in a Single-Cylinder Research Engine with Gaseous Fuel." *SAE Technical Papers* 2017-November(November). doi: 10.4271/2017-36-0359.
- Elishav, Oren, Bar Mosevitzky Lis, Elisa M. Miller, Douglas J. Arent, Agustin Valera-Medina, Alon Grinberg Dana, Gennady E. Shter, and Gideon S. Grader. 2020. "Progress and Prospective of Nitrogen-Based Alternative Fuels." *Chemical Reviews* 120(12):5352–5436. doi: 10.1021/acs.chemrev.9b00538.
- International Council on Clean Transportation. 2012. "Estimated Cost of Emission Reduction Technologies for Light-Duty Vehicles." (March).
- Long, Yanxiang, Gesheng Li, Zunhua Zhang, and Junjie Liang. 2021. "Application of Reformed Exhaust Gas Recirculation on Marine LNG Engines for NOx Emission Control." *Fuel* 291(January):120114. doi: 10.1016/j.fuel.2020.120114.
- Orbaiz, Pedro, and Michael Brear. 2014. "Energy Balance of a Spark Ignition Engine Running on Hydrogen, Synthesis Gas and Natural Gas." *SAE Technical Papers* 1. doi: 10.4271/2014-01-1337.
- Orbaiz, Pedro, Michael J. Brear, Payman Abbasi, and Peter A. Dennis. 2013. "A Comparative Study of a Spark Ignition Engine Running on Hydrogen, Synthesis Gas and Natural Gas." *SAE International Journal of Engines* 6(1):23–44. doi: 10.4271/2013-01-0229.
- Reşitoğlu, Ibrahim Aslan, Kemal Altinişik, and Ali Keskin. 2015. "The Pollutant Emissions from Diesel-Engine Vehicles and Exhaust Aftertreatment Systems." *Clean Technologies and Environmental Policy* 17(1):15–27. doi: 10.1007/s10098-014-0793-9.
- Shivapuji, Anand M., and S. Dasappa. 2015. "Influence of Fuel Hydrogen Fraction on Syngas Fueled SI Engine: Fuel Thermo-Physical Property Analysis and in-Cylinder Experimental Investigations." *International Journal of Hydrogen Energy* 40(32):10308–28. doi: 10.1016/j.ijhydene.2015.06.062.
- The Engineering Toolbox. 2017. "Gas Density , Molecular Weight and Density Gas Density , Molecular Weight and Density." 14–15.
- Xu, Hui, and Leon A. LaPointe. 2016. "Engine Capability Prediction for Spark Ignited Engine Fueled with Syngas." *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 138(10):1–6. doi: 10.1115/1.4033183.
- Zuccari, F., A. Santiangeli, A. Dell’Era, A. D’orazio, C. Fiori, and F. Orecchini. 2015. "Use of Bio-Methane for Auto Motive Application: Primary Energy Balance and Well to Wheel Analysis." *Energy Procedia* 81:255–71. doi: 10.1016/j.egypro.2015.12.095.