

3. Modelo da Auto-Ignição

Auto-ignição pode ser definida como a combustão espontânea sob certas condições termodinâmicas de uma mistura qualquer de um combustível com um oxidante. A condição de espontaneidade revela por si só o desafio de modelar este fenômeno, devido à grande dificuldade em prever quando e onde esta irá ocorrer. No escopo dos motores de combustão interna, o tempo de auto-ignição corresponde ao intervalo decorrido entre a formação da mistura e o início da sua combustão.

A auto-ignição consiste em seqüências de processos químicos e físicos complexos, dependentes das condições ambientes, das propriedades do combustível e do histórico da formação da mistura ar-combustível. A auto-ignição ocorre quando a energia liberada em forma de calor é maior do que o calor perdido para o entorno, resultando no aumento da temperatura da mistura, que por sua vez aumenta exponencialmente as velocidades das reações químicas. Estas não são poucas, nem ocorrem em um número reduzido de etapas; o mecanismo consiste em um grande número de reações simultâneas e interdependentes. A reação inicial, onde são produzidas espécies intermediárias a partir de moléculas estáveis (no caso, ar e combustível), é seguida de reações de propagação, onde produtos e outros radicais são formados; por fim, nas reações terminais, os radicais intermediários são eliminados (Heywood, 1988).

Nos motores Diesel, a auto-ignição controla boa parte do processo da combustão, sendo de extrema importância a sua correta previsão para a modelagem precisa do funcionamento do sistema. Nos motores Otto, apesar da ignição ser controlada por centelha, este fenômeno resulta em *knock*, prejudicial ao equipamento.

Pires da Cruz (2004) afirma que a utilização de novas técnicas de injeção (por exemplo, injeção piloto), em conjunto com novas estratégias de combustão, como o HCCI, muda drasticamente as condições termodinâmicas iniciais da mistura. Isto leva a observação de diferentes tipos de comportamento da auto-ignição; a velocidade das reações é muitas vezes função não linear destas condições e define a maneira com a qual o calor da reação é liberado.

Como os motores Diesel, os HCCI fazem uso da compressão para promover a ignição da mistura ar-combustível. Entretanto, para o segundo esta mistura é realizada previamente, enquanto que no primeiro o combustível é injetado ao final da compressão do ar. Potencialmente, os motores HCCI oferecem a mesma eficiência que os Diesel convencionais, com a vantagem de menores emissões de particulados e NO_x .

Para temperaturas de mistura tipicamente altas (acima de 1000 K), observa-se um mecanismo de auto-ignição onde o calor total da reação é liberado por completo durante um curto intervalo de tempo. Verifica-se que a temperatura e pressão atingem rápida e diretamente os valores observados após a combustão.

Para temperaturas mais baixas (em torno de 750 K), identifica-se um processo de ignição com dois estágios principais, durante os quais a maior parte do calor da reação é liberada. Inicialmente, observa-se a propagação da chama-fria; este é um processo de oxidação complexo, que é caracterizado pela produção de diversos radicais ativos e por um pequeno aumento na temperatura e pressão da mistura. A liberação de uma pequena parte do calor total da combustão é seguida por um decréscimo da velocidade das reações. Após certo tempo, a taxa da reação aumenta novamente, liberando rapidamente a parte restante do calor.

Ainda de acordo com Pires da Cruz (2004), devido ao seu grau de complexidade, o fenômeno da chama-fria não pode ser corretamente simulado a partir de correlações empíricas ou modelos químicos com um número reduzido de reações e espécies intermediárias. Em contrapartida, a solução de esquemas químicos complexos ainda não é computacionalmente viável para sua utilização na modelagem 3D da combustão em motores reais. Sendo assim, este autor iniciou uma estratégia que leva em consideração a complexidade requerida para a correta caracterização da auto-ignição sem que haja a necessidade da solução simultânea das reações químicas envolvidas no processo; tal estratégia serviu de base para o desenvolvimento do modelo proposto nesta seção.

3.1 Descrição do modelo para combustíveis de composição única

O modelo proposto Colin et al. (2005) denominado TKI (*Table Kinetics of Ignition*) procura reproduzir as diferentes configurações da auto-ignição verificadas a partir da utilização de tempos e taxas de reação em função das condições termodinâmicas locais da mistura. Estes tempos e taxas característicos

são obtidos através do pós-processamento dos resultados de simulações químicas complexas previamente realizadas; seu armazenamento se dá através de uma base de dados cujo tempo de acesso é infinitamente inferior ao da simulação destas reações em cada célula computacional. Este modelo é uma evolução do trabalho desenvolvido por Pires da Cruz (2004), que equacionava o processo a partir dos instantes relativos ao início da chama-fria e à ignição principal. Tal equacionamento retornava resultados superestimados justamente por considerar a liberação de calor apenas nestes dois instantes.

O modelo TKI foi idealizado inicialmente para a simulação da combustão do Diesel em motores. Por possuir uma composição complexa e não existirem mecanismos capazes de modelá-lo, Colin et al. (2005) reafirmaram a hipótese de Pires da Cruz (2004) e utilizaram um PRF (combustível de referência primária, do inglês, *primary reference fuel*) como seu substituto; a escolha do n-heptano (C_7H_{16}) é possível porque suas características de auto-ignição, em termos do número de cetano, são próximas. Não obstante, como ambos possuem características físicas diferentes, a modelagem do combustível real por este substituto é limitada somente ao aspecto da auto-ignição.

Concebido para avaliar a qualidade da combustão do Diesel sob compressão, o número de cetano representa uma medida da sua qualidade de auto-ignição, onde valores maiores correspondem a menores tempos. Basicamente, este número é definido pelo percentual de n-hexadecano ($C_{16}H_{34}$) em certa mistura com alfa-metil naftaleno ($C_{11}H_{10}$), ambos PRF, que possui o mesmo tempo de auto-ignição que o combustível avaliado quando utilizados em um motor de testes padrão. Tal motor é denominado CFR (*Cooperative Fuel Research*) e foi definido pela ASTM (*American Society for Testing Materials*).

Colin et al. (2005) fazem uso mais uma vez das considerações feitas por Pires da Cruz (2004) para a interpretação do instante da auto-ignição. Primeiramente, estabelece-se que este deva ser contabilizado em relação ao momento em que o combustível e o oxidante entram em contato e podem começar a reagir. Para determinar o instante em que a ignição é considerada como ocorrida, vários critérios podem ser utilizados, baseando-se no fato de que quando comparada à escala de tempo total da simulação este processo é extremamente rápido. Desta forma, define-se este instante como o de maior taxa de variação da temperatura. Tal critério revela-se compatível com outros, como os de máxima

concentração de radicais de OH e CH. No entanto, estes últimos não são capazes de capturar explicitamente o início da chama-fria, enquanto que a extensão do primeiro a este caso se dá de forma direta.

3.1.1 Modelagem dos tipos da auto-ignição

Apresenta-se na Figura 3.1 a representação esquemática da curva da temperatura versus tempo utilizada pelo modelo para as duas configurações da auto-ignição verificadas para temperaturas tidas como baixas e altas, no contexto dos motores de combustão interna.

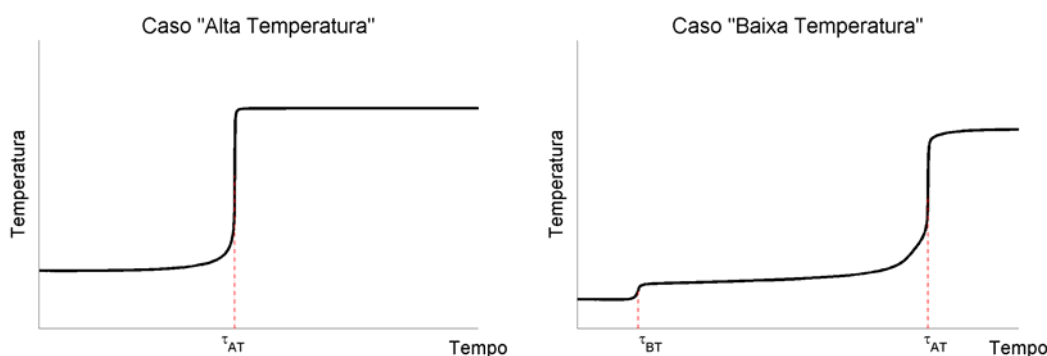


Figura 3.1 – Representação da temperatura vs tempo para as diferentes configurações da auto-ignição em motores de combustão interna

No primeiro caso, denominado “alta temperatura” (subscrito AT), todo o calor da reação Δh é liberado e a temperatura final é atingida durante um curto intervalo de tempo, quando comparado ao instante τ_{AT} ; tal instante é definido quando a taxa da reação atinge seu valor máximo.

O caso “baixa temperatura” (subscrito BT) é caracterizado pela presença do fenômeno da chama-fria; de maneira diferente, uma pequena parte do calor total da reação C (entre 5 e 20% do total) é liberada rapidamente no instante τ_{BT} definido pelo primeiro ponto de máxima taxa de reação. Em seguida, durante um intervalo relativamente grande, é observada a redução da velocidade das reações; apesar desta redução, ainda é verificada certa liberação de calor que acarreta no aumento, mesmo que pequeno, da temperatura. Finalmente, a taxa da reação aumenta novamente no instante τ_{AT} e o restante do calor é liberado de maneira semelhante ao caso “alta temperatura”.

Verifica-se que para modelar corretamente o processo da combustão no segundo caso apresentado, é necessário estimar de maneira precisa a liberação do

calor da reação desde o seu início. Para tal, o modelo propõe uma abordagem que tenta aproximar-se ao máximo da cinética real deste fenômeno.

3.1.2 Simulações químicas, pós-processamento e construção da base de dados

Os seguintes passos descrevem o processo de modelagem e são repetidos para faixas de parâmetros de entrada, dando origem à base de dados mencionada anteriormente. Cada simulação da auto-ignição é realizada à pressão constante em função de condições iniciais de temperatura e pressão, além dos parâmetros que definem a composição da mistura (razão de equivalência e o percentual de gases inertes em excesso, como por exemplo, N₂, CO e CO₂).

As simulações químicas complexas foram realizadas com o código Senkin desenvolvido por Lutz et al. (1988). Este programa computa a evolução no tempo da reação de misturas homogêneas em um sistema fechado, levando-se em conta reações químicas elementares. A oxidação do n-heptano foi calculada com base no mecanismo químico desenvolvido por Curran et al. (1998), que contém 544 espécies e 2446 reações reversíveis, tendo sido validado a partir de diversas configurações experimentais.

1. O instante do início da chama-fria τ_{BT} é computado, correspondendo ao ponto de máxima da taxa da reação durante este estágio; no caso de sua ausência (ou seja, na presença de apenas uma máxima taxa de reação global), o instante τ_{AT} é computado em seu lugar.
2. Mesmo que em alguns casos a liberação de calor durante o início da chama fria seja lenta, considera-se que uma pequena parte do calor da reação é rapidamente liberada ao ser atingido o instante τ_{BT} . O parâmetro C relativo a esta fração é então calculado para a temperatura indicada pelo cruzamento da reta tangente ao ponto de menor dT/dt entre τ_{BT} e τ_{AT} com o primeiro instante.
3. O restante da auto-ignição é descrito através de uma variável de progresso c que indica percentualmente em que estágio este processo se encontra. Para definição de c , assume-se que uma variável de progresso para o acompanhamento da temperatura é equivalente a uma destinada ao do combustível. Esta hipótese se mostra razoável dado que o aumento da temperatura é diretamente proporcional ao consumo do combustível.

Sendo assim, esta variável é definida pela Eq. 3.1, onde T , T_0 e T_F são respectivamente as temperaturas instantânea, inicial e final. Os valores da derivada no tempo (Eq. 3.2) são obtidos para sete valores fixos concentrados na região de temperatura mais baixa para capturar adequadamente as maiores variações da taxa de reação ($c_1 = 0,05$; $c_2 = 0,075$; $c_3 = 0,1$; $c_4 = 0,125$; $c_5 = 0,15$; $c_6 = 0,2$; $c_7 = 0,3$). A partir de c_7 , considera-se que a reação é rápida, e $\dot{\omega}_c$ torna-se suficientemente alto para promover a auto-ignição (Figura 3.2).

$$c = \frac{T - T_0}{T_F - T_0} \quad \text{Eq. 3.1}$$

$$\dot{\omega}_c = \frac{dc}{dt} = \frac{1}{T_F - T_0} \frac{dT}{dt} \quad \text{Eq. 3.2}$$

Em condições normais, a faixa dos parâmetros que controlam a auto-ignição dentro da câmara de combustão é extensa e seus valores variam em função do tempo e da localização espacial. Após o fechamento da válvula de admissão, é possível verificar temperaturas entre 300 e 1500 K, pressões de 1 a 10 MPa, misturas ar-combustível extremamente ricas e empobrecidas e proporção de gases inertes de até 100%.

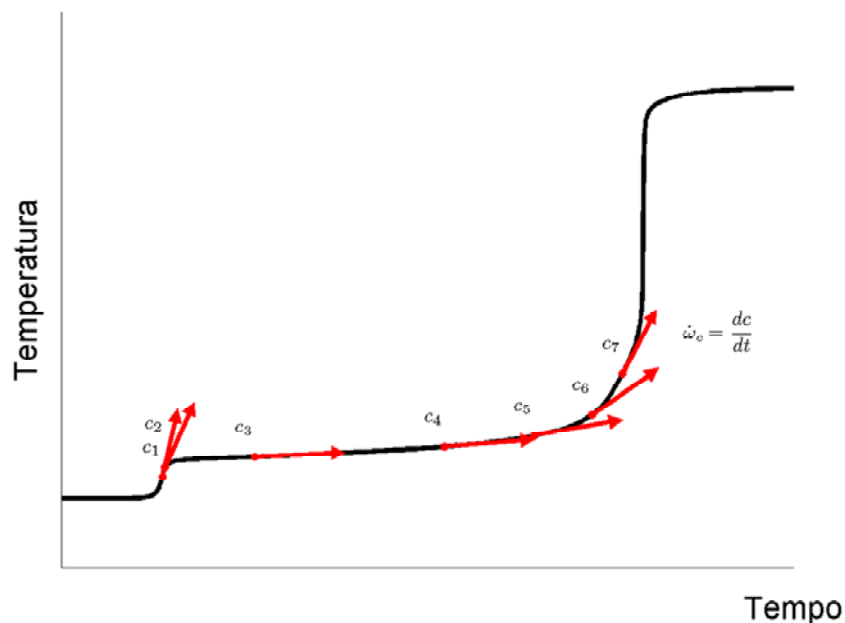


Figura 3.2 – Variável de progresso do modelo TKI

As seguintes listas de parâmetros utilizadas por Colin et al. (2005) para a construção da base de dados foram propostas inicialmente por Pires da Cruz (2004) a partir de cálculos preliminares que identificaram as regiões onde as características da auto-ignição apresentavam maior sensibilidade. Sendo assim, foi possível evitar que a grande extensão destas faixas de parâmetros inviabilizasse a construção e implementação da referida base. Como resultado, o número de simulações necessárias para sua construção foi reduzido a 12.960:

- 54 valores de temperatura inicial de 600 a 1500 K, com resolução de 10 K na região entre 660 e 1000 K.
- 8 valores de pressão inicial de 10 a 80 bar, com intervalos de 5 bar entre 10 e 30 bar e 20 bar entre 40 e 80 bar.
- 6 valores para razão de equivalência de 0,3 a 3,0, com intervalos de 0,2 entre 0,2 e 0,7 e 0,5 entre 1,0 e 3,0.
- 5 percentuais de gases inertes: 0, 30, 60, 80 e 90%.

3.1.3 Equacionamento da auto-ignição

A auto-ignição é computada em cada célula da malha computacional a partir das equações presentes nesta seção para a zona de mistura entre o ar, combustível e os gases residuais.

A definição precisa das condições termodinâmicas da mistura é de extrema importância para a correta obtenção não somente do instante τ_{BT} , mas também do calor liberado durante a chama-fria e ao longo do processo de ignição. Colin et al. (2005) afirmam que a pressão, a razão de equivalência e a proporção dos gases inertes não são influenciadas pela ausência ou ocorrência da combustão no interior da zona de mistura. Sendo assim, é razoável que seus valores médios instantâneos sejam utilizados ao longo de todo o processo.

Contudo, considerações especiais cabem à escolha da temperatura utilizada para acessar os parâmetros contidos na base de dados. Primeiramente, é necessário enfatizar que esta última foi construída a partir de simulações químicas à pressão constante. Logicamente, utilizar a temperatura inicial T_0 da mistura para a obtenção destes parâmetros em cada iteração seria correto no caso da pressão permanecer constante ao longo da simulação. Esta premissa basta para descartar a utilização da temperatura média da célula, pois para este mesmo caso, a liberação de calor a tornaria superior à T_0 .

Todavia, quando há restrição do volume, a utilização de T_0 conduziria à superestimação do instante da ignição principal. Isto ocorre porque a temperatura dos gases não queimados torna-se maior do que T_0 , resultado do aumento da pressão proporcionado pela liberação de calor ao longo do processo.

Desta forma, a temperatura dos gases não queimados surge como alternativa para acessar a base de dados. Esta deve ser calculada a partir de uma equação de transporte para sua entalpia que considere o trabalho de compressão e as perdas de calor. Além disso, sua utilização mostra-se válida também para os cálculos à pressão constante, quando permanece invariável e equivalente à T_0 .

A computação inicial do processo em cada ponto é baseada na criação de uma espécie fictícia Y_I cujo monitoramento indica percentualmente a proximidade do início da chama-fria. Esta espécie não possui significado químico, sendo seu valor inicial nulo. Seu valor médio pode ser transportado pelo interior da câmara de combustão por difusão e convecção, de acordo com a Eq. 3.3.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_I}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_I) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} D_i \frac{\partial \tilde{Y}_I}{\partial x_i} \right) + \bar{\omega}_I \quad \text{Eq. 3.3}$$

O termo de fonte da equação acima pode ser calculado pela Eq. 3.4 e é função do instante de início da chama-fria τ_{BT} , obtido por interpolação da base de dados, a partir das condições termodinâmicas iniciais da zona de mistura. Além disso, este termo é proporcional ao valor da variável de rastreamento de combustível $Y_{R,C}$ contida nesta zona. Esta variável representa a quantidade de combustível misturado ao ar e gases residuais que existiria na célula computacional na ausência de reações químicas. A chama-fria tem início quando a variável Y_I torna-se equivalente à $Y_{R,C}$. A partir desta definição, tem-se que $f(\tau_{BT})$ é proporcional ao inverso de τ_{BT} .

$$\bar{\omega}_I = \bar{\rho} \tilde{Y}_{R,C} f(\tau_{BT}) \quad \text{Eq. 3.4}$$

Computado o instante do início da chama-fria, a parcela do combustível restante disponível para ser consumida Y_C é então calculada pela Eq. 3.5. Assume-se que o tempo de reação τ_c é relativamente pequeno quando comparado a todas as outras escalas de tempo, sendo-lhe atribuído valor constante e igual à 2×10^{-5} s. Assim como τ_{BT} , C possui seu valor retirado da base de dados através de

interpolação. Quando o caso “alta temperatura” ocorre, ou seja, não há presença da chama-fria, C é nulo e a liberação de calor é descrita pelos passos seguintes. Inicialmente, Y_C é equivalente à $Y_{R,C}$.

$$\frac{d\bar{\rho}\tilde{Y}_C}{dt} = -\bar{\rho}\frac{\tilde{Y}_C}{\tau_c} \tilde{Y}_C > (1-C)\tilde{Y}_{R,C} \quad \text{Eq. 3.5}$$

Por fim, a ignição principal é computada através da variável de progresso \tilde{c} cujos valores das taxas de reação estão presentes na base de dados. Analogamente à Eq. 3.1, a Eq. 3.6 define esta variável nesta situação.

$$\tilde{c} \equiv \frac{\tilde{Y}_{R,C} - \tilde{Y}_C}{\tilde{Y}_{R,C}} = 1 - \frac{\tilde{Y}_C}{\tilde{Y}_{R,C}} \quad \text{Eq. 3.6}$$

O consumo do restante do combustível se é descrito pela Eq. 3.7. A taxa de reação da variável de progresso $\dot{\omega}_c$ é novamente obtida por interpolação da base de dados para o estágio correspondente da variável de progresso \tilde{c} e, como mencionado anteriormente, é função das condições termodinâmicas instantâneas da mistura. Este cálculo acontece em cada passo de tempo até o fim da reação.

$$\frac{d\bar{\rho}\tilde{Y}_C}{dt} = -\bar{\rho}\dot{\omega}_c\tilde{Y}_{R,C} \quad \tilde{Y}_C < (1-C)\tilde{Y}_{R,C} \quad \text{Eq. 3.7}$$

3.2 Extensão do modelo para combustíveis com diferentes formulações e múltiplos combustíveis

O modelo proposto na seção 3.1 potencialmente reproduz a auto-ignição de diversos combustíveis quando utilizado dentro dos mesmos limites para os quais foi desenvolvido. Para que isto seja possível, basta que as simulações para a construção da base de dados sejam realizadas com o combustível escolhido ou, como no caso apresentado, com um substituto quimicamente mais simples que tenha comportamento equivalente em termos da auto-ignição.

Em aplicações reais, é desejável a avaliação da influência de diferentes formulações de um mesmo combustível no funcionamento do motor; por exemplo, existem diversos tipos de Diesel e gasolina comerciais com performances distintas. Para sua reprodução correta pelo modelo, seria necessária a construção de uma base de dados para cada uma destas formulações, normalmente complexas e de difícil modelagem.

Uma alternativa é a utilização dos PRF. Mesmo possuindo composição simples, quando misturados em determinadas proporções são capazes de reproduzir o comportamento de outros combustíveis. Isto é evidenciado por sua utilização nos testes para a obtenção, por exemplo, do número de cetano e de octanas de combustíveis comerciais.

De maneira análoga ao número de cetano, o número de octanas para um combustível representa uma medida da sua resistência à detonação em motores de combustão interna. Esta é comumente utilizada para caracterizar combustíveis nos motores de ciclo Otto. Inversamente ao número de cetano, maiores valores representam maior resistência à auto-ignição. O mesmo motor CFR é requerido para a caracterização e o número de octanas equivale ao percentual de iso-octano (C_8H_{18}) em certa mistura com o n-heptano que possui a mesma resistência à detonação que o combustível avaliado. Duas metodologias diferentes para estes testes dão origem aos largamente utilizados MON e RON (*Motor Octane Number* e *Research Octane Number*), sendo que para o primeiro, as condições operacionais são mais severas; desta forma, o MON é usualmente inferior ao RON. Por definição, para os PRF, o RON é equivalente ao MON.

A partir da combinação entre o n-heptano (RON = MON = 0) e iso-octano (RON = MON = 100) em diversas proporções, torna-se possível a construção de uma base de dados capaz de reproduzir as características da auto-ignição de diversos combustíveis com diferentes formulações. Surge então a necessidade da definição de uma variável adicional relativa às condições iniciais da mistura, além da temperatura, pressão, razão de equivalência e percentual de gases inertes. Tal variável seria responsável por realizar a correspondência entre o combustível em análise e a mistura de PRF com comportamento equivalente. Intuitivamente, o MON ou o RON surgiriam como primeira escolha para esta indexação.

Entretanto, segundo Kalghatgi et al. (2003) medidas convencionais como o MON e o RON não são capazes de prever o comportamento de combustíveis em motores HCCI, onde a qualidade da auto-ignição é a característica mais importante. Isto ocorre porque a química envolvida no processo da combustão do iso-octano e do n-heptano (componentes parafínicos) é diferente para os combustíveis reais (compostos normalmente por aromáticos, oleofinos e oxigenados). Seu uso seria apenas indicado quando as condições operacionais são as mesmas que as de referência para obtenção destes índices.

Para descrever o comportamento da auto-ignição de diferentes combustíveis nestes motores, Kalghatgi et al. (2003) propuseram uma equação que combina o MON e o RON com as características de funcionamento do equipamento. Segundo os autores, esta equação melhor retrata a qualidade da auto-ignição mesmo para os motores Otto convencionais. Os autores realizaram experimentos em um motor HCCI, onde foram testadas sete misturas diferentes (todas elas compostas por dois ou mais combustíveis) a partir de quatro condições de operação distintas. Em cada teste, foi medida a pressão no interior da câmara de combustão em função do ângulo de virabrequim, a partir da qual é possível estimar a taxa de liberação de calor ao longo do ciclo. Definiu-se o instante da auto-ignição como o ângulo onde a liberação do calor acumulada atinge 50% de seu valor total (denominado CA50). Os resultados indicaram que este instante é bem correlacionado com o da máxima taxa de liberação do calor.

Para cada uma das condições operacionais, Kalghatgi et al. (2003) demonstram que não há correlação significativa entre o CA50 e o RON ou MON; contudo, demonstrou-se que o índice de octanas (*OI*) definido pela Eq. 3.8 possui grande relação com este instante. Esta equação é função do RON e da sensibilidade *S* do combustível; o parâmetro *K* depende apenas das condições operacionais do motor, devendo ser determinada empiricamente. Assim como o para o RON e o MON, quanto maior a resistência à auto-ignição, maior o *OI*. Por definição, para as condições de obtenção do RON, *K* equivale a 0, enquanto que para o MON, *K* é igual a 1.

$$\begin{aligned} OI &= RON - KS \\ S &= RON - MON \end{aligned} \qquad \text{Eq. 3.8}$$

Posteriormente, Risberg et al. (2003) realizaram testes adicionais no mesmo motor utilizado por Kalghatgi et al. (2003) com outros combustíveis e condições operacionais e evidenciaram que *K* depende principalmente do histórico da temperatura e pressão da mistura ar-combustível antes da auto-ignição. Posteriormente, Kalghatgi e Head (2004) utilizaram outro motor para mais experimentos e confirmaram a independência de *K* dos outros principais parâmetros de funcionamento (rotação e razão de equivalência), inclusive do desenho da câmara. A Eq. 3.9 computa *K* em função de T_{comp15} , parâmetro

escolhido arbitrariamente que representa a temperatura da mistura para a pressão de 15 bar.

$$\begin{aligned} K &= 0,0056T_{comp15} - 4,68 & T_{comp15} &\leq 825 K \\ K &= 0,0426T_{comp15} - 35,2 & T_{comp15} &> 825 K \end{aligned} \quad \text{Eq. 3.9}$$

As equações 3.8 e 3.9 permitem que seja feita a equivalência entre diversas formulações de combustíveis. Ou seja, caso tenham o mesmo OI , estas deverão apresentar comportamentos compatíveis em termos da auto-ignição. Portanto, o OI pode ser escolhido como o parâmetro de acesso à base de dados.

A adaptação do modelo para combustíveis com diferentes formulações abre caminho para a simulação de misturas de mais de um combustível. Na realidade, os combustíveis reais são misturas de inúmeros componentes mais simples; conseqüentemente, a combinação de mais de um combustível também é uma junção de diversos componentes. Sendo assim, a mesma abordagem aqui demonstrada é válida para ambas as situações.

O caso de múltiplos combustíveis pode revelar misturas com diferentes composições simultaneamente em pontos distintos da câmara de combustão. Quando não são pré-misturados, é preciso levar-se em consideração que os tempos para mistura e para a auto-ignição são da mesma ordem de grandeza. Esta situação é perfeitamente plausível quando um dos combustíveis é admitido com o ar, enquanto que o outro é injetado posteriormente na câmara (por exemplo, modo bicomcombustível Diesel-gasolina ou Diesel-gás natural); no momento da injeção do segundo, a região atingida pelo *spray* possuiria uma composição diferente da encontrada, por exemplo, próxima às paredes da câmara.

Assim mesmo, a situação acima apresentada pode ser inteiramente reproduzida. Ao invés de um mesmo valor de OI para todos os pontos da câmara de combustão, serão identificados diferentes valores em função da composição local da mistura. Para tal, basta que toda a faixa de OI a ser encontrada na câmara ao longo da simulação seja prevista pela base de dados; os cálculos devem ser realizados para cada célula da malha computacional, inclusive para o parâmetro K .