

## 6. Conclusões e Recomendações

Realizou-se no presente trabalho a adaptação de um modelo existente da auto-ignição de combustíveis para o caso da combustão Diesel-gás. O modelo adaptado foi implementado no código computacional denominado IFP-C3D.

O modelo TKI foi concebido originalmente para a auto-ignição do Diesel, sendo posteriormente estendido ao caso de múltiplos combustíveis. O diferencial da modelagem apresentada em relação às demais encontradas na literatura é a sua capacidade de capturar corretamente o fenômeno da chama-fria presente na combustão do Diesel à baixas pressões e temperaturas. Como a presença do gás natural na combustão do Diesel resulta em comportamento semelhante (alteração das taxas de liberação do calor e prolongação do tempo da ignição), esta plataforma revelou-se interessante para a aplicação Diesel-gás.

O primeiro estágio para a adaptação do modelo foi a proposição de uma equação que relaciona os números de octanas do Diesel e do gás natural com a qualidade da auto-ignição da sua combinação resultante (Eq. 4.3). Em seguida, com o auxílio do código Senkin para cálculos químicos complexos, foi analisada a hipótese formulada.

Verificou-se numericamente que a equação apresenta resultados satisfatórios para altas temperaturas (acima de 1000 K). Limitações foram constatadas em baixas temperaturas (em torno de 800 K), para gases com concentrações de metano inferiores a 90% em volume.

O passo seguinte resultou na construção de uma base de dados, a partir de simulações realizadas novamente pelo Senkin, contendo os parâmetros necessários ao funcionamento do modelo. São estes o instante de início da chama-fria, o percentual de liberação do calor da reação neste instante e as taxas de reação para sete valores pré-fixados da variável que mede o progresso da combustão. Para a modelagem da mistura Diesel-gás foram utilizados o n-heptano e o metano. Ao total, foram simuladas 66.240 condições iniciais.

O terceiro estágio se deu com a implementação do modelo no código IFP-C3D e sua verificação. Os resultados de diversos cálculos foram comparados com os fornecidos pelo Senkin e indicaram seu correto funcionamento.

Por fim, realizou-se a simulação numérica Diesel-gás de um modelo de motor Diesel validado experimentalmente. Os resultados foram analisados de maneira qualitativa, estando em acordo com os evidenciados pela literatura. Foram sensíveis as diferenças nas taxas de liberação de calor na medida em que a proporção de gás na câmara era aumentada em substituição ao Diesel.

Não foi possível a validação do modelo experimentalmente devido à ausência de informações cruciais para compor as simulações. Recomenda-se que esta verificação seja realizada futuramente, não só com resultados de testes em motores comerciais, mas também em sistemas mais simples como a máquina de compressão rápida recém adquirida pela PUC-Rio através do ITUC.