

# Simulazione quasi-dimensionale del processo di combustione di motori a combustione interna ad accensione comandata alimentati ad idrogeno

Federico Perini, Giuseppe Cantore, Fabrizio Paltrinieri

Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Civile

Università di Modena e Reggio Emilia

strada Vignolese 905/B, 41125 Modena (MO)

federico.perini@unimore.it

18 novembre 2009

## Sommario

Negli ultimi anni, l'entrata in vigore di normative sempre più stringenti per quanto riguarda le emissioni inquinanti allo scarico dei motori endotermici, ha alimentato un crescente interesse nei confronti dello studio di motori alimentati con combustibili alternativi, sia nell'ambito dei motori ad accensione comandata, che per quelli ad accensione spontanea. In particolare, la possibilità di impiegare combustibili gassosi come fonte energetica di propulsori basati su architetture costruttive tradizionali rappresenta un possibile ponte nella fase di transizione verso lo sviluppo di tecnologie innovative (propulsione ibrida, elettrica, fuel-cells). In quest'ottica, nell'ambito dello svolgimento di un Dottorato di Ricerca in corso presso il Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Civile dell'Università di Modena e Reggio Emilia, che ha come tematica di ricerca lo sviluppo e la applicazione di codici di simulazione numerica del ciclo di funzionamento di MCI per la trazione veicolare, e con particolare riguardo allo studio del processo di combustione in motori ad accensione comandata, si è sviluppato un codice di calcolo Matlab® basato su di un modello numerico quasi-dimensionale. I primi risultati ottenuti al fine di verificare l'attendibilità dello strumento sviluppato mostrano un comportamento consistente non solo per una particolare condizione operativa del motore, ma per un ampio intervallo di condizioni di funzionamento. Sempre in questa fase, lo strumento di calcolo è stato accoppiato ad un codice di ottimizzazione genetica precedentemente sviluppato, mostran-

do la propria capacità di combinare un buon grado di affidabilità a tempi e risorse di calcolo limitati.

## 1 Introduzione

Lo sviluppo e la diffusione del motore alternativo alimentato ad idrogeno rappresentano una prospettiva concreta nel breve-medio termine, dal momento che esso può costituire una risorsa chiave nel periodo di transizione verso una vera e propria "economia dell'idrogeno". Infatti, la conversione ad idrogeno di un motore a combustione interna ad accensione comandata richiede un intervento molto limitato, ed – in particolare – gran parte della componentistica necessaria alla realizzazione di un sistema di alimentazione dell'idrogeno può essere mutuata da comuni sistemi di alimentazione per combustibili gassosi. La possibilità della alimentazione ad idrogeno, inoltre, estende le possibilità di gestione operativa del motore, dal momento che la elevata velocità di combustione ne consente un funzionamento stabile anche in corrispondenza di miscele molto magre. Per queste ragioni, si rende necessaria la realizzazione di codici di calcolo che consentano una simulazione rapida ed efficiente del processo di combustione, nonché delle principali grandezze operative di funzionamento, al fine di poter condurre in modo rapido ed economico l'ottimizzazione della sua gestione in tutte le condizioni di carico. Per questo motivo, gli autori hanno realizzato un modello di combustione quasi-dimensionale per motori ad accensione comandata alimentati ad idrogeno, basato sulla suddivisione della ca-

rica interna al cilindro in due macrozone, una di carica fresca ed una di gas combusti, separate da un fronte di fiamma sferico di spessore assunto infinitesimo. Appositi sottomodelli sono stati implementati per la caratterizzazione della velocità di combustione laminare delle miscele aria-idrogeno; dell'interazione dello spettro di turbolenza sulla combustione al fronte di fiamma; dello scambio termico in parete; della turbolenza media nel cilindro; dello sviluppo del fronte di fiamma in camere di combustione di forma qualsiasi; della composizione chimica all'equilibrio dei prodotti della combustione; delle principali emissioni inquinanti (NOx). Il modello di combustione sviluppato è stato successivamente validato sulla base di dati sperimentali relativi ad un motore CFR standard. I risultati delle simulazioni presentano una corrispondenza molto accurata nel confronto con le misurazioni sperimentali, non solo per quanto riguarda le prestazioni globali del motore, ma anche in termini di andamento della pressione media interno-cilindro. Per quanto riguarda la modellazione delle emissioni inquinanti, pur non essendo attualmente disponibili rilievi sperimentali al banco, gli andamenti calcolati mostrano una buona corrispondenza con quanto noto in letteratura, evidenziando buone prospettive per quanto riguarda la capacità predittiva dello strumento di calcolo anche in quest'ambito. Infine, per mostrare le potenzialità di impiego del presente modello, con l'obiettivo di realizzare l'ottimizzazione dei principali parametri operativi del motore alimentato ad idrogeno, si è valutata come possibile applicazione la ottimizzazione del funzionamento in termini sia di prestazioni, che di emissioni inquinanti, per un particolare punto operativo, al variare dei possibili valori di dosatura della miscela ed anticipo di accensione. Il confronto tra la strategia di ottimizzazione genetica adottata, e la realizzazione di uno scenario di ottimo completo, basato su uno spazio di simulazioni che ricopra interamente il campo di variazione dei due suddetti parametri, ha mostrato come la prima permetta di individuare il punto di ottimo, con la medesima precisione, ma riducendo il tempo di calcolo richiesto del 70% circa.

## 2 Il modello di simulazione quasi-dimensionale

La differenza principale tra i modelli cosiddetti zero-dimensionali, basati unicamente su bilanci di tipo termodinamico, ed i modelli predittivi di tipo quasi-

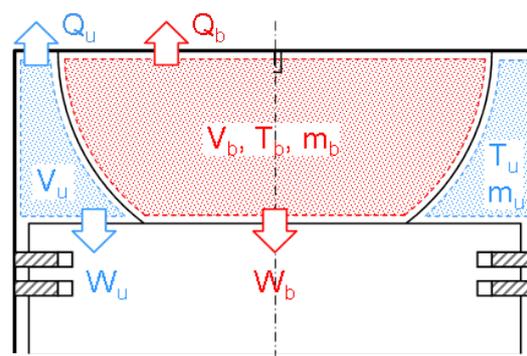


Figura 1: Rappresentazione schematica della suddivisione in due zone della camera di combustione.

dimensionale risiede nella loro capacità di prevedere una descrizione semplificata dei fenomeni tridimensionali che si sviluppano all'interno del cilindro [3]. Il modello predittivo qui descritto segue l'approccio più comunemente diffuso, che prevede la suddivisione della camera di combustione in due zone separate, come illustrato in figura 1. In particolare, il fronte di fiamma è rappresentato idealmente come una superficie sferica avente uno spessore infinitesimo; questa superficie è troncata dalla presenza delle pareti del cilindro, e, all'avanzare della combustione, si propaga per raggi crescenti a partire da un centro definito dalla posizione della candela. Questa superficie suddivide fisicamente la carica interna al cilindro in due zone separate: una prima costituita di gas combusti, e racchiusa all'interno della superficie del fronte di fiamma; una seconda di carica fresca, ad occupare il volume rimanente. La modellazione di queste zone non prevede scambio di energia attraverso il fronte di fiamma. Una approssimazione ulteriore risiede nella assunzione che ambo le zone siano costituite da miscele di gas perfetti: la carica fresca come miscela di combustibile ed aria standard (rappresentata come miscela al 21% di ossigeno e 79% di azoto), la zona di gas combusti avente invece composizione calcolata per mezzo di un algoritmo di calcolo degli equilibri chimici di dissociazione per le specie più significative, come meglio descritto a seguire. In totale, è stato considerato un insieme di 11 specie chimiche. Poiché le due zone rappresentano due sistemi termodinamici, ciascuna di esse, oltre che una massa ed un volume istantanei, possiede anche un valore proprio di temperatura, assunta uniforme all'interno di tutta la zo-

na; al contrario, entrambe le zone sono accomunate da un unico valore di pressione media interno-cilindro. Infine, nello stadio di sviluppo corrente del modello, non sono previsti scambi di massa per la carica, né attraverso le valvole, né come trafileamenti verso il basamento, e di conseguenza è rappresentabile unicamente la parte di potenza, a valvole chiuse, del ciclo indicato.

Per quanto riguarda la parte di ciclo simulata, tra l'istante di chiusura della valvola di aspirazione e quello di apertura della valvola di scarico, l'andamento temporale della pressione media interno-cilindro, oltre che delle temperature delle due zone, sono calcolate per mezzo di tre equazioni differenziali ordinarie, ottenute sviluppando l'equazione di conservazione dell'energia – o primo principio della Termodinamica:

$$dU = \delta Q - \delta W. \quad (1)$$

Da qui, è possibile ricavare lo sviluppo delle tre equazioni seguenti:

$$\begin{aligned} \frac{dp}{dt} = & \left( \frac{c_{v,u}}{c_{p,u}} V_u - \frac{c_{v,b}}{c_{p,u}} \frac{R_{m,u}}{R_{m,b}} V_u + \frac{c_{v,b}}{R_{m,b}} V \right)^{-1} \\ & \cdot \left\{ \left( 1 + \frac{c_{v,b}}{R_{m,b}} \right) p \frac{dV}{dt} + \right. \\ & + \left[ (u_b - u_u) - c_{v,b} \left( T_b - \frac{R_{m,u}}{R_{m,b}} T_u \right) \right] \frac{dm_b}{dt} \\ & \left. + \left( \frac{c_{v,u}}{c_{p,u}} - \frac{c_{v,b}}{c_{p,u}} \frac{R_{m,u}}{R_{m,b}} \right) - \frac{dQ_u}{dt} - \frac{dQ}{dt} \right\} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\frac{dT_u}{dt} = \frac{1}{m_u c_{p,u}} \left( V_u \frac{dp}{dt} - \frac{dQ_u}{dt} \right) \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_b}{dt} = & \frac{1}{m_b c_{p,b}} \left[ p \frac{dV}{dt} - (R_{m,b} T_b - R_{m,u} T_u) \frac{dm_b}{dt} \right. \\ & \left. - \frac{R_{m,u}}{c_{p,u}} \left( V_u \frac{dp}{dt} + \frac{dQ_u}{dt} \right) + V \frac{dp}{dt} \right] \end{aligned} \quad (4)$$

Per brevità, non si è riportata la derivazione dettagliata delle tre equazioni, che comunque può essere consultata in [3, 11]. La suddivisione della carica all'interno del cilindro in due zone separate è in generale applicabile non solo all'intervallo angolare durante il quale si sviluppa la combustione, ma anche alle fasi di compressione, in cui è presente unicamente carica fresca,

ed in fase di espansione, durante la quale la miscela è composta quasi unicamente da gas combusti. Tuttavia, poiché non vi è in queste fasi alcuno sviluppo del fronte di fiamma, né si osservano sensibili cambiamenti nella composizione globale della carica, si è scelto di ridurre qui l'approccio quasi-dimensionale ad una rappresentazione a zona singola, che consente di risolvere unicamente due equazioni per il calcolo dell'evoluzione della pressione e della temperatura medie interno-cilindro:

$$\frac{dp}{dt} = \frac{1}{V} \left( m R_m \frac{dT}{dt} - p \frac{dV}{dt} \right) \quad (5)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{m c_v} \left( - \frac{dQ}{dt} - p \frac{dV}{dt} \right) \quad (6)$$

Complessivamente, quindi, il calcolo della parte a valvole chiuse del ciclo indicato è suddiviso in un totale di tre fasi: nella prima fase di compressione, è risolto il sistema di equazioni di tipo mono-dimensionale 5, 6; vi è poi il calcolo dello sviluppo della combustione, il quale prevede la soluzione delle equazioni 2,3,4, opportunamente inizializzate; una ultima fase di espansione, in cui il sistema è ricondotto alle medesime equazioni sfruttate per la compressione.

### 3 Sottomodelli

La soluzione delle tre equazioni differenziali per la simulazione della combustione ad accensione comandata richiede che ne sia effettuata la chiusura per mezzo di una serie di sottomodelli, che descrivano, in particolare, il tasso di combustione della miscela, quale risultato dei processi di sviluppo della geometria del fronte di fiamma e dell'interazione del fronte di fiamma con lo spettro di turbolenza in camera, nonché i flussi termici per convezione ed irraggiamento verso le pareti del cilindro. Per quanto concerne la produzione di inquinanti, sono stati sviluppati sottomodelli specifici che modellano la cinetica del monossido di carbonio e degli  $NO_x$ . Nel seguito, i sottomodelli implementati sono discussi singolarmente.

#### 3.1 Velocità di combustione laminare

Una componente molto importante della capacità predittiva di un modello quasi-dimensionale dipende dalla accuratezza con la quale i sottomodelli per la chiusura del sistema di equazioni differenziali sono rappresentati. In particolare, in un motore alternativo ad accensione

comandata, risulta essere di importanza cruciale la stima della velocità di combustione laminare della miscela aria-combustibile, a causa della stretta correlazione che lo sviluppo della combustione turbolenta premiscelata ha nei suoi confronti. Recentemente, attività crescente è disponibile in letteratura che tratti, sperimentalmente o numericamente, metodologie volte alla ricerca di correlazioni analitiche affidabili per descrivere accuratamente la velocità di combustione laminare di miscele di aria ed idrogeno, in corrispondenza di una gamma di pressioni, temperature e rapporti di equivalenza la più ampia possibile [20, 21, 22]. Nel presente lavoro, si è adottata l'equazione di correlazione di Verhelst et al., [22, 20], che tiene in considerazione uno spettro di pressioni e temperature tipiche di funzionamento di motori ad accensione comandata. Questa correlazione prevede una dipendenza della velocità di combustione laminare dal rapporto di equivalenza  $\phi$ , dalla pressione  $p$ , dalla temperatura  $T$  di combustione, e dalla eventuale frazione di gas combusti (residui) presente nella miscela,  $f_{res}$ :

$$S_{L,H_2}(\phi, p, T, f_{res}) = S_{10} \left( \frac{T}{T_0} \right)^\alpha \left( \frac{p}{p_0} \right)^\beta (1 - \gamma f_{res}). \quad (7)$$

L'andamento della funzione di correlazione di cui alla equazione 7, riportato in figura 2, in corrispondenza di valori di pressione e temperatura di riferimento, in confronto con dati sperimentali reperiti in letteratura, mostra un generale ottimo accordo con le misurazioni sperimentali.

### 3.2 Interazione turbolenza-fronte di fiamma

Lo sviluppo della combustione turbolenta premiscelata, che avviene all'interno dei motori endotermici alternativi ad accensione comandata, dipende fortemente dalla struttura dello spettro turbolento del campo di moto della carica interna al cilindro [29, 14], e specialmente dalle scale più piccole, di grandezza all'incirca pari alla micro-scala di turbolenza di Taylor,  $L_T$ . Per questo motivo, è necessario prevedere, all'interno della modellazione quasi-dimensionale della evoluzione del fronte di fiamma, un sottomodello appropriato che rappresenti in modo accurato l'interazione tra quest'ultima ed il campo di moto turbolento interno al cilindro. In particolare, per quanto riguarda quest'aspetto, si è ricorsi all'idea inizialmente proposta da Blizard e Keck [34], e successivamente estesa in lavori successivi [35, 36],

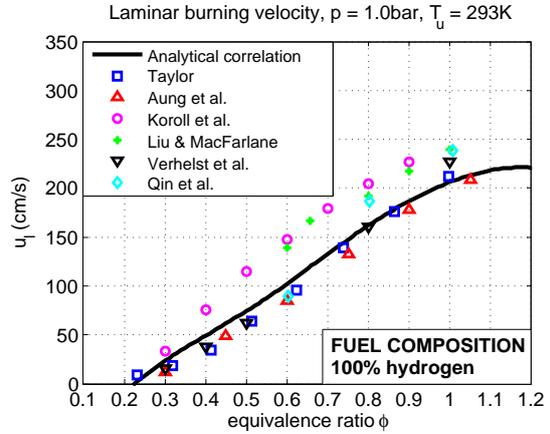


Figura 2: Confronto tra la correlazione di velocità di combustione laminare di miscele di aria ed idrogeno adottata e misurazioni sperimentali reperite in letteratura.

che modella l'ingresso e l'ingolfamento della carica fresca all'interno della superficie media del fronte di fiamma, causati dalla presenza di vortici turbolenti, secondo una equazione di sviluppo simile per struttura a quella propria della velocità di combustione laminare:

$$\frac{dm_e}{dt} = \rho_u A_f u_{te}, \quad (8)$$

in cui è introdotto un termine di velocità di 'ingolfamento turbolento',  $u_{te}$ , e dove il termine  $A_f$  non rappresenta l'area effettiva del fronte di fiamma turbolento, ma una superficie media del fronte di fiamma. Noto, istante per istante, l'ammontare di carica fresca ingolfatosi all'interno del fronte di fiamma turbolento, il tasso di combustione è assunto proporzionale alla massa di carica fresca complessivamente entrata all'interno del fronte medio di ingolfamento:

$$\frac{dm_b}{dt} = \frac{m_e - m_b}{\tau_b}; \quad (9)$$

questo processo di combustione è governato dalla presenza di una costante di tempo caratteristica  $\tau_b$ , che assume che la combustione della miscela avvenga all'interno delle scale di turbolenza più piccole, e li bruci in modo laminare. La costante di tempo è allora solitamente definita come il rapporto tra la micro-scala di turbolenza di Taylor e la velocità di combustione laminare:  $\tau_b = L_T/S_L$ . Secondo l'analisi di Tabaczynski

[52], la lunghezza della scala di turbolenza di Taylor può essere correlata alla scala integrale di lunghezza ed al numero di Reynolds turbolento:  $L_T \propto L_I Re_t^{-1/2}$ ; ove il coefficiente di proporzionalità è stato individuato come  $\sqrt{15}$ .

Il fronte di fiamma medio è solitamente modellato come una superficie sferica troncata dalle pareti del cilindro; è possibile descriverne analiticamente lo sviluppo, nel caso si assuma una geometria della camera di combustione semplice, solitamente piatta [37]; nondimeno, in questo caso è stato adottato l'approccio di Poulos ed Heywood [38], che può essere adoperato per camere di combustione di forma qualsiasi. Questo approccio prevede la proiezione di un numero molto grande di punti, distribuiti uniformemente sulla superficie della sfera contenente il fronte di fiamma; successivamente, l'area del fronte di fiamma è calcolata come prodotto dell'area della superficie completa della sfera, moltiplicata per il rapporto tra il numero di punti che cadono all'interno del volume della camera di combustione ed il numero totale di punti proiettati. Per ridurre il più possibile le risorse di calcolo richieste dal modello quasi-dimensionale, una procedura di mappatura dei valori di area del fronte di fiamma, in funzione dell'angolo di manovella e del volume occupato dal fronte di fiamma è svolta a priori e salvata all'interno di una tabella di riscontro, valevole per una unica determinata camera di combustione. La figura 3 mostra la validazione dell' algoritmo di calcolo approssimativo dell'area del fronte di fiamma, in confronto con i dati esatti reperiti in [38], per una geometria semplificata di camera di combustione. L'applicazione dell' algoritmo di calcolo è invece mostrata in figura 4, ove sono rappresentati i dati memorizzati nella tabella di riscontro per la camera di combustione di un motore CFR avente rapporto di compressione pari a  $\beta = 9.5$ . In particolare, i valori dell'area del fronte di fiamma sono memorizzati, per ciascun angolo di manovella significativo (da  $-100^\circ\text{CA}$  a  $100^\circ\text{CA}$ ), in funzione del volume della carica bruciata normalizzato rispetto al volume della camera di combustione.

Le due equazioni ?? descrivono dunque, sole, il fenomeno della combustione turbolenta premiscelata, includendo il fenomeno di sviluppo turbolento del fronte di fiamma, e la fase di completamento della combustione che avviene dopo che tutta la carica fresca inizialmente presente nel cilindro è entrata all'interno del fronte di fiamma; tipicamente, questa fase segue un andamento temporale di decadimento di

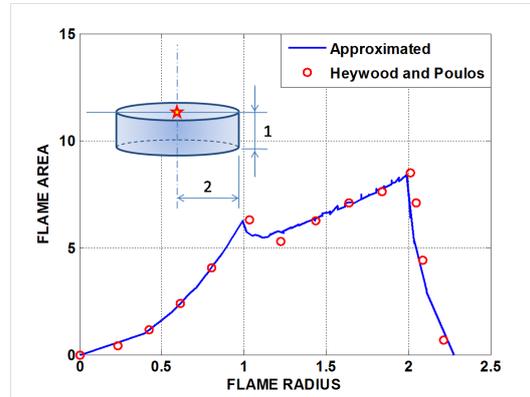


Figura 3: Validazione dell' algoritmo proposto per il calcolo dell'area e del raggio medi del fronte di fiamma, in un caso test semplificato, confrontato con i dati esatti [38].

tipo esponenziale.

Tra la molteplicità di modelli disponibili in letteratura, che realizzano la chiusura di questo sistema di equazioni, a rappresentare la velocità di 'ingolfamento' turbolento, l'approccio frattale [2] è uno di quelli maggiormente applicati e testati, in grado di restituire risultati generalmente molto affidabili [39, 40, 41]. Questo approccio si basa sull'assunzione che l'effetto principale dello spettro di turbolenza sul fronte di fiamma consista nella sua increspatura rispetto ad una superficie liscia, e conseguentemente nell'incremento della sua area effettiva. Conseguentemente, secondo questo approccio la velocità di combustione turbolenta è espressa con riferimento alla velocità di combustione laminare, incrementata di un termine che tiene conto della distorsione del fronte di fiamma:

$$u_t = u_L \left( \frac{L_{max}}{L_{min}} \right)^{D_3-2}, \quad (10)$$

dove  $u_L$  rappresenta la velocità di combustione laminare per fronte di fiamma deformato liscio;  $L_{min}$  ed  $L_{max}$  rappresentano, rispettivamente, la scala minima e la scala massima di distorsione turbolenta;  $D_3$  la dimensione frattale caratteristica della superficie increspata, che caratterizza il grado di increspatura del fronte di fiamma turbolento. Per quanto riguarda la deformazione del fronte di fiamma liscio, è solitamente sufficiente considerare un modello anche semplice: nel caso corrente, è stato adottato il modello di Matthews e Chin [2] per calcolare la relazione tra  $S_L$  ed  $u_L$ . Per quanto riguarda

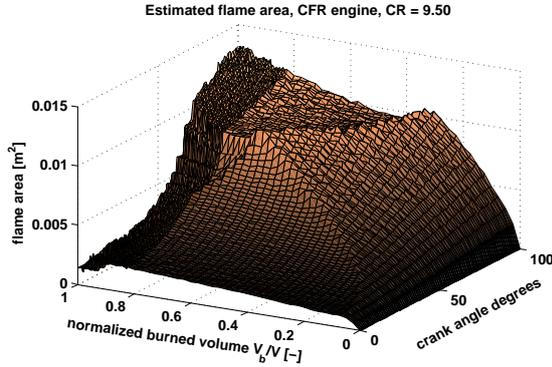


Figura 4: Superficie di area del fronte di fiamma calcolata con l’algoritmo approssimato, per un motore CFR avente rapporto di compressione  $CR = 9.5$ .

la previsione della dimensione frattale  $D_3$ , è stata adottata la definizione euristica di Santavicca et al. [42], generalmente riconosciuta come affidabile:

$$D_3 = C_{D_3} 2.35 \frac{u'}{u' + S_L} + 2.0 \frac{S_L}{u' + S_L}, \quad (11)$$

dove l’effetto di una costante di calibrazione,  $C_{D_3}$ , sarà discusso in seguito. Matthews e Chin [2] hanno mostrato anche che la migliore assunzione, per quanto riguarda la relazione tra i limiti inferiore e superiore di cut-off delle scale di increspamento, è pari al rapporto tra la massima e la minima scala di turbolenza considerata:  $L_{max}/L_{min} = L_I/L_K \simeq Re_t^{0.75}$ . Affinché, infine, l’equazione 11 possa essere valutata puntualmente nel corso della simulazione, è necessario che sia previsto un sottomodello appropriato per la rappresentazione della turbolenza media interno-cilindro. Per questo motivo, si è provveduto ad implementare un semplice modello di turbolenza, nella versione proposta dal Hall e Bracco [43]:

$$u'_{TDC} = 0.75 \bar{u}_p = 0.75 (2sn), \quad (12)$$

$$u' = u'_{TDC} (1 - \theta/90); \quad (13)$$

questo modello prevede un decadimento lineare della fluttuazione turbolenta RMS  $u'$  a partire dal punto morto superiore.

Infine, per la corretta previsione della velocità di combustione è necessario considerare anche un modello che rappresenti il transitorio di sviluppo del fronte di fiamma turbolento. Questo fenomeno avviene nel momento in cui il kernel di fiamma, creatosi attorno alla candela

immediatamente dopo il rilascio di energia da parte della scintilla, cresce rapidamente dopo l’accensione, ed incontra un campo di moto affetto da uno spettro di turbolenza più ampio rispetto a quello che caratterizza una fiamma turbolenta sviluppata [51]. Per questo motivo, è necessario aggiungere un termine transitorio di tipo esponenziale, che corregga la velocità di combustione turbolenta completamente sviluppata,  $u_t$ . In particolare, secondo l’approccio di Lipatnikov e Chomiak [51], il transitorio di sviluppo del fronte di fiamma turbolento può essere modellato, in rapporto alla velocità di combustione turbolenta pienamente sviluppata come:

$$\frac{u_{t,t}}{u_t} = \left\{ 1 + \frac{\tau'}{t} \left[ \exp\left(-\frac{t}{\tau'} - 1\right) \right] \right\}^{1/2}; \quad (14)$$

questa relazione è determinata a partire dalla teoria della diffusione turbolenta, ed assumendo che la scala temporale  $\tau'$  di sviluppo turbolento del fronte di fiamma dipenda dalla diffusività turbolenta,  $\tau' = D_t/u'$ . Secondo gli stessi autori, essa può essere espressa in funzione della scala integrale di turbolenza come  $\tau' = 0.55L/u'$  [53]. Il termine  $t$  rappresenta il tempo trascorso dall’istante di accensione. L’equazione 14 consente quindi di quantificare il valore transitorio di velocità di combustione turbolenta,  $u_{t,t}$ ; per la calibrazione del modello, discussa nel seguito, è stato considerato un coefficiente correttivo per la stima di  $\tau'$ , che ha l’effetto di modificare il tempo caratteristico del transitorio.

### 3.3 Inizializzazione del kernel di fiamma.

L’integrazione delle equazioni differenziali che definiscono la traccia di pressione media interno-cilindro, oltre che le temperature delle due zone, e le masse di carica fresca, miscela entrata nel fronte di fiamma, e gas combustibili, richiede che esse siano inizializzate in modo appropriato in termini di condizioni iniziali. Nel modello sviluppato, non è stata considerata la primissima fase di formazione del kernel di fiamma che segue la scarica elettrica della candela, mentre si assume una massa iniziale del kernel  $m_b = 0.01m_{tot}$  pari all’1% della carica complessiva interna al cilindro [3]. Alcuni autori impongono condizioni iniziali in termini di volume del kernel [30, 2, 31]; tuttavia, queste assunzioni sono più sensibili quando si consideri l’alimentazione ad idrogeno, la densità del quale è molto minore rispetto a quella dei combustibili fossili

più diffusi. Per quanto riguarda l'inizializzazione della massa 'ingolfata' all'interno del fronte di fiamma medio, si è imposto, come assunto da Verhelst e Sierens [30], che essa sia pari al doppio della massa iniziale del kernel. Conseguentemente, la massa di carica fresca inizializzata al momento dell'accensione ammonta al 99% della massa complessiva interna al cilindro. Per quanto riguarda l'imposizione delle condizioni iniziali di temperatura, si assume che lo sviluppo del kernel avvenga alla temperatura di combustione adiabatica della miscela di idrogeno ed aria [11, 30]; quest'ultima è calcolata secondo una procedura iterativa volta ad uguagliare l'entalpia totale dei reagenti e dei prodotti, come proposto da Warnatz et al. [14]. Infine, la temperatura della carica fresca è inizializzata applicando l'equazione di stato dei gas perfetti, sulla base dei suoi valori iniziali di massa e volume.

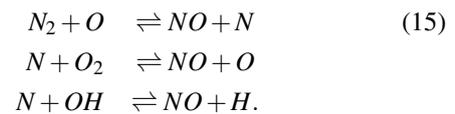
Per entrambe le zone, considerate miscele di gas perfetti, le proprietà termodinamiche principali sono calcolate secondo la teoria cinetica dei gas [15], e le composizioni chimiche sono valutate per mezzo di un algoritmo di calcolo di equilibri chimici che considera un totale di undici specie. La spiegazione dettagliata di queste procedure è riportata a seguire.

### 3.4 Emissioni inquinanti

La minimizzazione delle emissioni inquinanti prodotte dai motori alternativi ad accensione comandata ricopre oggi un ruolo fondamentale in fase di progettazione, ed è una prerogativa di un codice quasi-dimensionale di simulazione della combustione in motori alternativi prevedere modelli predittivi delle principali emissioni inquinanti. Anche se le assunzioni semplificative tipiche della rappresentazione quasi-dimensionale rendono necessaria l'adozione di costanti di calibrazione per la taratura dei modelli, che rendono questi ultimi difficilmente adottabili per motori differenti senza una previa fase di calibrazione sulla base di dati relativi a misurazioni sperimentali, cionondimeno gli andamenti rapportati alla variazione dei principali parametri motoristici operativi possono essere catturati da questi modelli con un elevato grado di affidabilità [28]. All'interno dell'ambiente di calcolo trattato, è stato implementato un sottomodello di calcolo delle emissioni inquinanti in termini di ossido di azoto (NO), caratterizzato da uno schema reattivo semplificato. Nel corso della durata della combustione, una equazione differenziale aggiuntiva è risolta in ciascuna zona, che

modella la cinetica di formazione dell'inquinante. In particolare, per quanto riguarda la formazione degli ossidi di azoto nei motori endotermici alternativi ad accensione comandata, sono solitamente considerate complessivamente tre diverse fonti [?]: una prima ("NO termico"), caratterizzata da un valore elevato di energia di attivazione, che la rende successivamente rapida esclusivamente in corrispondenza di valori di temperatura localmente elevati; vi è inoltre un secondo meccanismo (solitamente chiamato "NO di Fenimore"), che descrive la formazione dell'ossido di azoto al fronte di fiamma come ricombinazione transitoria di gruppi CH; un'ultima sorgente di ossido di azoto, che considera la ricombinazione dell'ossido nitroso ( $N_2O$ ) in  $NO$  – quest'ultimo contributo risulta essere significativo specialmente in condizioni di miscele molto magre, e basse temperature. A causa dell'assenza di carbonio nel combustibile, si è ritenuto di poter trascurare il contributo dato dal meccanismo di Fenimore, e si è considerato il meccanismo termico come unica sorgente di ossido di azoto, come assunto nella maggior parte dei modelli di combustione quasi-dimensionali [28], anche se l'ampio intervallo di infiammabilità dell'idrogeno allarga le possibilità di funzionamento dei motori ad accensione comandata anche a rapporti di equivalenza della miscela abbastanza magri [17], il che potrebbe portare a risultati meno accurati nella parte inferiore dell'intervallo di rapporti di equivalenza  $\phi$ .

Per quanto concerne il meccanismo termico, si è considerato ed implementato il modello esteso di Zel'dovich:



Il tasso di formazione dell'ossido di azoto è calcolato come equazione differenziale ordinaria, in cui un unico coefficiente di calibrazione,  $c_{NO}$ , è incluso a premoltiplicare la velocità di reazione in avanti della prima reazione chimica nel sistema 15:

$$\begin{aligned} \frac{d[NO]}{dt} &= c_{NO} k_{f,1} [N_2][O] - k_{b,1} [NO][N] + & (16) \\ &+ k_{f,2} [N][O_2] - k_{b,2} [NO][O] + \\ &+ k_{f,3} [N][OH] - k_{b,3} [NO][H] \end{aligned}$$

Il sommario dei coefficienti adottati per il calcolo della velocità di reazione, secondo la formulazione di Arrhenius, è riportato in tabella 3.4.

Reaction	A	b	E
1. $N_2 + O \rightarrow NO + N$	3.30e+12	0.20	0.0
2. $N + O_2 \rightarrow NO + O$	6.40e+09	1.00	3160.0
3. $N + OH \rightarrow NO + H$	3.80e+13	0.00	0.0

Tabella 1: Coefficienti in formulazione di Arrhenius per le velocità di reazione in avanti adottati nel modello esteso di Zel'dovich (15), espressi nella forma  $k = AT^b \exp(-E/T)$ . Unità in cm, mol, s, K. [14]

### 3.5 Scambio termico in parete

Per quanto riguarda lo scambio termico attraverso le pareti del cilindro, rappresentato dai termini  $dQ/dt$  e  $dQ_u/dt$  nelle equazioni (2,3,4), è stato implementato un approccio abbastanza comune, che considera contemporaneamente che lo scambio termico avvenga per convezione ed irraggiamento [45]. La formulazione adottata assomma un approccio di Woschni convenzionale, che prevede un coefficiente convettivo equivalente [46], ad un termine radiativo, che tenga in considerazione gli effetti dovuti ai gas combusti ad elevata temperatura. La potenza termica radiativa istantanea è dunque calcolata come:

$$\frac{dQ_r}{dt} = \epsilon_a \sigma_0 A_w (T_r^4 - T_w^4), \quad (17)$$

ove  $\sigma_0 = 5.67E - 08 J m^{-2} K^{-4} s^{-1}$  rappresenta la costante universale di Stefan-Boltzmann,  $A_w$  la superficie del cilindro raggiunta dai gas combusti,  $T_r$  e  $T_w$  le temperature medie stimate dei gas combusti e delle pareti del cilindro. Il termine  $\epsilon_a$  rappresenta una emissività apparente di corpo grigio, che è assunta variare linearmente a partire da un valore massimo  $\epsilon_a = 0.9$  all'inizio della combustione, e decrescente fino a zero attraverso l'intera corsa di espansione.

## 4 Proprietà termodinamiche e composizione della miscela

### 4.1 Proprietà della miscela

La previsione delle proprietà termodinamiche della miscela di aria ed idrogeno molecolare riveste un ruolo fondamentale per la corretta rappresentazione dello sviluppo del fronte di fiamma, e conseguentemente delle tracce di pressione e temperatura interno cilindro. Per questo motivo, è stato sviluppato un ambiente di calcolo di equilibri chimici per la previsione delle prin-

cipali proprietà termodinamiche di miscele di gas perfetti, e successivamente questo stesso è stato accoppiato al presente codice quasi-dimensionale. In particolare, in questo caso si è considerato un insieme di dodici specie, che rappresentano i composti più significativi nella composizione delle miscele di prodotti della combustione degli idrocarburi:

$$N_s = \{O_2, N_2, CO_2, H_2O, H, H_2, N, NO, O, OH, CO, CH_4\}, \quad (18)$$

anche se la procedura adoperata è del tutto generale, e può essere virtualmente estesa a qualsiasi miscela di gas perfetti. In particolare, la composizione della carica fresca è inizializzata sulla base del rapporto di equivalenza  $\phi$  della miscela, assumendo quale composizione del combustibile unicamente idrogeno molecolare,  $H_2$ . Successivamente, per ciascuno dei dodici componenti della miscela, sono ricavati il calore specifico su base molare a pressione costante, e l'entalpia specifica su base molare, a partire da polinomi di interpolazione in funzione della temperatura assoluta  $T$ :

$$c_{p,i} = a_{i,1} + a_{i,2}T + a_{i,3}T^2 + a_{i,4}T^3 + \frac{a_{i,5}}{T^2}, \quad (19)$$

$$h_i = a_{i,1}T + a_{i,2}\frac{T^2}{2} + a_{i,3}\frac{T^3}{3} + a_{i,4}\frac{T^4}{4} - \frac{a_{i,5}}{T} + a_{i,6}, \quad (20)$$

ove i coefficienti di interpolazione  $a$  sono stati dedotti dai dati tabulati nel database NIST [13]. Infine, il calore specifico a volume costante è ricavato come differenza del calore specifico a pressione costante rispetto alla costante universale dei gas:  $c_{v,i} = c_{p,i} - R_u$  [14]. Per quanto riguarda la costante specifica della miscela di gas, definita come  $R = R_u/W$ , essa è determinata sulla base della conoscenza del peso molecolare medio della miscela:

$$W = \left( \sum_{i \in N_s} \frac{y_i}{W_i} \right)^{-1}. \quad (21)$$

Infine, le tre proprietà termodinamiche suesposte  $\vartheta$  ( $\vartheta = \{c_p, c_v, h\}$ ), mediate per la miscela, sono calcolate come medie ponderate delle quantità relative ai singoli composti [14]:  $\vartheta = \sum_{i \in N_s} y_i \vartheta_i / W_i$ .

La conoscenza di una importante caratteristica di trasporto molecolare è di rilievo fondamentale per il calcolo del numero di Reynolds turbolento, e per questo motivo è stata implementata una procedura per il calcolo della viscosità media della miscela  $\eta$ , basata sulla teoria cinetica dei gas. Il valore di viscosità per ciascuna

singola specie chimica è espresso come:

$$\eta_i = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m_i k_B T}}{\pi \sigma_i^2 \Omega^{(2,2)*}}, \quad (22)$$

dove  $m_i$  rappresenta la massa molecolare,  $k_B$  la costante universale di Boltzmann,  $T$  la temperatura assoluta,  $\sigma$  il diametro di collisione di Lennard-Jones. Il valore dell'integrale di collisione di trasporto  $\Omega^{(2,2)*}$ , che descrive la deviazione rispetto alla ipotesi di molecole considerate come sfere rigide, è calcolato in funzione dei valori adimensionali di temperatura ridotta  $T_i^* = k_B T / \epsilon_i$  e di momento di dipolo ridotto,  $\delta_i = \mu_i^2 / (2\epsilon_i \sigma_i^3)$  [16]:

$$\Omega^{(2,2)*} = \frac{4}{5} \left( 1 + \frac{1}{T_i^*} + \frac{\delta_i^2}{4T_i^*} \right). \quad (23)$$

I dati relativi ai diametri di collisione di Lennard-Jones  $\sigma$ , alle profondità delle buche di potenziale  $\epsilon_i$ , ai momenti di dipolo  $\mu_i$ , ai numeri di collisione di rilassamento rotazionale sono stati ricavati da [8]. Infine, il valore di viscosità medio della miscela è calcolato come [16]:

$$\eta = \sum_{i \in N_s} \frac{x_i \sqrt{\eta_i}}{\frac{x_i}{\sqrt{\eta_i}} + \sum_{j \in N_s, j \neq i} \left( \frac{x_j s_{ij} A_{ij}}{\sqrt{\eta_j}} \right)}, \quad (24)$$

dove  $A_{ij}$  è una funzione dei soli pesi molecolari, ed  $s_{ij}$  rappresenta un fattore correttivo per le collisioni di molecole polari con molecole non polari. I risultati del calcolo sono stati validati sulla base dei dati sperimentali elencati in [16].

## 4.2 Combustione stechiometrica e composizione della miscela

Si è assunta la composizione chimica della carica fresca come formata unicamente da una composizione di rifornimento dell'aria (21% ossigeno molecolare, 79% azoto molecolare) e da una frazione di combustibile. Sotto questa ipotesi, la composizione della miscela coinvolta nella reazione di combustione è stimata come [4]:

$$H_2 + \frac{1}{2\phi} (O_2 + 3.762N_2); \quad (25)$$

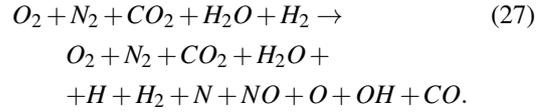
conseguentemente, i prodotti della combustione sono stati calcolati come riassunto nel prospetto di tabella 2, dove  $\phi = \alpha / \alpha_s$  rappresenta il rapporto di equivalenza della miscela, e il rapporto aria-combustibile stechiometrico è stato analogamente calcolato come [17]:

$$\alpha_s = \frac{4.76 \cdot 0.5 W_{air}}{W_{H_2}}. \quad (26)$$

Specie	$\phi < 1$	$\phi = 1$	$\phi > 1$
$CO_2$	0	0	0
$H_2O$	1	1	$\frac{1}{\phi}$
$N_2$	$3.76 \frac{0.5}{\phi}$	$3.76 \cdot 0.5$	$3.76 \frac{0.5}{\phi}$
$O_2$	$0.5 \cdot \frac{1-\phi}{\phi}$	0	0
$H_2$	0	0	$\frac{\phi-1}{\phi}$
$CH_4$	0	0	0

Tabella 2: Composizione della miscela di gas combusti da combustione stechiometrica: numero di moli dei prodotti per ogni mole di combustibile.

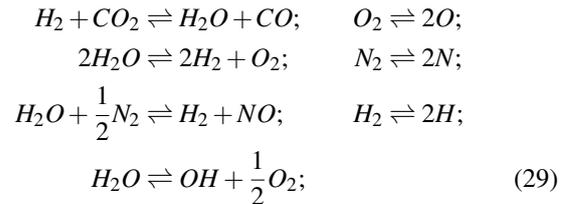
Il calcolo stechiometrico della reazione di combustione dell'idrogeno è necessario per inizializzare il calcolo degli equilibri di dissociazione delle molecole. In particolare, è stato sviluppato un algoritmo di calcolo sulla base di quanto realizzato da Rakopoulos et al., per la combustione Diesel [19]. In particolare, il calcolo prevede una unica reazione di dissociazione che coinvolge un totale di 5 specie iniziali ed 11 specie dissociate:



Questa reazione include quattro equazioni di conservazione della massa, per il rispetto dei bilanci degli atomi di  $C, H, O, N$  nel sistema reattivo:

$$\begin{aligned} x_{CO_2}^o &= \Psi [x_{CO_2} + x_{CO}] \quad (28) \\ 2x_{H_2O}^o + 2x_{H_2}^o &= \Psi [2x_{H_2O} + x_H + \\ &+ 2x_{H_2} + x_{OH}] \\ 2x_{O_2}^o &= \Psi [2x_{N_2} + x_N + x_{NO}] \\ 2x_{O_2}^o + 2x_{CO_2}^o + x_{H_2O}^o &= \Psi [2x_{O_2} + 2x_{CO_2} + 2x_{H_2O} + \\ &+ x_{NO} + x_O + x_{OH} + x_{CO}] \end{aligned}$$

dove l'apice  $o$  denota le condizioni di inizializzazione prima del calcolo della dissociazione, e  $\Psi$  il rapporto tra il numero di moli dei prodotti per ogni mole di reagenti. Il sistema in equilibrio prevede un totale di 7 reazioni di dissociazione, apportando al sistema di calcolo 7 ulteriori equazioni, nelle medesime 11 incognite:



per ciascuno di questi equilibri, la costante di equilibrio  $K_{p,j}$  è nota in funzione del valore di temperatura assoluta del sistema chimico, ed è calcolata in base alla variazione di energia libera di Gibbs del sistema [14]:

$$\ln K_p = \frac{1}{R_u T} \left[ \sum_{j \in N_s} (v_j'' - v_j') \Delta g_j^o \right]. \quad (30)$$

Sfruttando la definizione, le costanti di equilibrio sono poi espresse secondo funzioni non lineari delle frazioni molari di prodotti e di reagenti, secondo la formula [14]:

$$K_p = \prod_{j \in N_s} [x_{M_j,eq} p]^{(v_j'' - v_j')}, \quad (31)$$

dove  $M_j$  indica la  $j$ -esima specie nel sistema chimico. Infine, il sistema non-lineare di undici equazioni in undici incognite, ricavato a partire dalle equazioni 28,31 è risolto utilizzando il metodo iterativo di Newton-Raphson, a partire dalla soluzione di inizializzazione pari al risultato del calcolo di reazione di combustione stechiometrica. In figura 5, i risultati del calcolo delle concentrazioni all'equilibrio dei prodotti della combustione dell'idrogeno sono graficati al variare della temperatura di equilibrio, per tre differenti casi di rapporto di equivalenza della carica fresca. In particolare, è stato considerato un intervallo di temperature comprese tra 1000 K e 4000 K.

## 5 Validazione del codice

Il processo di calibrazione del codice è stato effettuato sulla base dell'individuazione di un totale di cinque coefficienti correttivi, relativi alla modellazione dei processi di sviluppo del fronte di fiamma, di interazione del fronte di fiamma con lo spettro di turbolenza in camera, e dello scambio termico in parete. In particolare, si è ricavato un unico set di coefficienti, calibrato sulla base di una condizione operativa motore di riferimento, e successivamente si è validato questo stesso sulla base dei dati sperimentali disponibili, che prevedono la variazione dei principali parametri operativi del motore. Per supplire alla scarsità di dati sperimentali a disposizione, si è fatto riferimento in corso di validazione a campagne sperimentali dettagliate reperite in letteratura, condotte su di un motore standard CFR, monocilindrico, avente cilindrata di  $612.5 \text{ cm}^3$ . Il dettaglio delle prove sperimentali condotte dal prof. Verhelst è riportato in [30, 22]. La prima delle costanti calibrate è rappresentata da un coefficiente  $C_Q$  di correzione del mo-

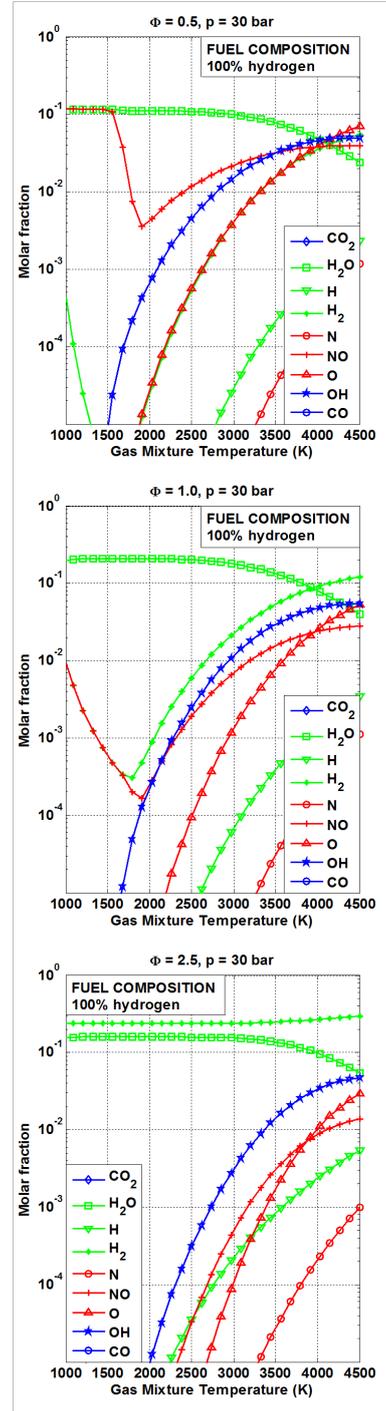


Figura 5: Composizione della miscela di gas combusti calcolata secondo lo schema di equilibrio proposto, in corrispondenza di rapporti di equivalenza  $\phi = 0.5; 1.0; 2.5$ .

dello di scambio termico in parete: esso è un coefficiente moltiplicativo costante, che amplifica/riduce il flusso termico istantaneo attraverso le pareti del cilindro. Il valore di questo coefficiente è invariante nel corso della simulazione, dal momento che non sono stati considerati su di esso effetti dovuti ai singoli intervalli angolari di compressione, combustione, espansione. Una seconda costante  $C_{D_3}$  è stata considerata quale correzione per la dimensione frattale della superficie del fronte di fiamma pienamente sviluppato, come effetto della distorsione causata dalla presenza di un campo di moto turbolento, come suggerito da Matthews e Chin [2], mentre essa non influisce sulla dimensione frattale caratteristica della superficie del fronte di fiamma assunta come liscia (quest'ultima dipende unicamente dalla velocità di combustione laminare, e corrisponde ad una dimensione frattale complessiva  $D_3 = 2.0$ ). Questo parametro è stato assunto costante, e pari a  $C_{D_3} = 1.013$ , come suggerito da Verhelst per condizioni-tipo relative ad un motore CFR [30].

Una terza costante,  $C_{u'}$ , è stata adottata per caratterizzare la turbolenza media interno-cilindro, in termini di fluttuazione turbolenta RMS, dal momento che l'assunzione proposta nella equazione 12 è di natura empirica, e non tiene in considerazione l'influenza esercitata da molti fattori specificatamente tridimensionali sullo spettro di turbolenza dopo la chiusura della valvola di aspirazione, quali il disegno dei condotti di aspirazione, la geometria degli accoppiamenti valvola-sede valvola, la loro permeabilità, etc. Per questo motivo, è stato imposto un coefficiente calibrativo  $C_{u'} = 1.50$  che incrementa il valore di fluttuazione turbolenta  $u'$  ricavato per mezzo del modello di Hall e Bracco. Il quarto coefficiente di calibrazione riguarda il sottomodulo specifico di sviluppo non-stazionario del fronte di fiamma turbolento [51]: la costante  $C_{\tau'}$  premoltiplica il tempo caratteristico di sviluppo turbolento,  $\tau'$ . Incrementando il valore del parametro, aumenta conseguentemente il tempo di sviluppo del fronte di fiamma turbolento, che caratterizza la prima fase di combustione. Nel caso presente, è stato considerato un coefficiente, mantenuto costante per tutte le simulazioni,  $C_{\tau'} = 0.95$ ; conseguentemente, l'effetto della leggera diminuzione di  $\tau'$  comporta una transizione a turbolento del fronte di fiamma più rapida. L'ultima costante di calibrazione considerata governa, premoltiplicandola, la scala temporale globale caratteristica della combustione turbolenta,  $\tau_b$ , ed ha come effetto diretto la correzione della approssimazione sul valore stimato di microscala di turbolenza di Taylor,  $L_T$ . In quest'ultimo caso, è stato adottato un valore

di  $C_{\tau_b} = 1.25$ . Per ulteriore dettaglio, il prospetto delle condizioni di inizializzazione della simulazione adottata come riferimento per la calibrazione del modello di combustione è stato riportato in tabella 3.

La figura 6 mostra il risultato della calibrazione del

Parametro	Unità	Rif. [30]
Combustibile	–	100% $H_2$
$f_{H_2}$	–	1.00
$n$	rpm	600
$\beta$	–	9.0
$\phi$	–	0.588
$\theta_0$	CA ATDC	-136.0
$T_0$	K	298
$m_{tot}$	kg	7.35e-04
fraz. residui	%	0.0
$\theta_{IT}$	CA ATDC	-20
$C_{\tau_b}$	–	1.25
$C_{\tau'}$	–	0.95
$C_{u'}$	–	1.5
$C_{D_3}$	–	1.013
$C_Q$	–	1.50

Tabella 3: Parametri considerati per l'inizializzazione del caso di riferimento per la calibrazione del modello di combustione quasi-dimensionale, per motore CFR.

modello sulla curva di pressione media interno-cilindro considerata: come si può notare, il modello è in grado di rappresentare con un grado di affidabilità molto elevato l'intero intervallo angolare di sviluppo del fronte di fiamma. Per successivamente validare il modello così calibrato, si è proceduto a valutarne il comportamento al variare di due parametri motoristici significativi, in base al confronto con le misurazioni sperimentali effettuate sul medesimo motore CFR. In figura 5 è considerato il caso di variazione del rapporto di compressione del motore  $\beta$ : sono in questo caso stati mantenuti costanti l'anticipo di accensione  $\theta_{SOI} = -15^\circ$ , la dosatura della miscela  $\lambda = 1.7$ , ed il regime di rotazione  $n = 600rpm$ . Come è possibile notare, il modello è in grado di rappresentare, senza alcuna variazione ai coefficienti di calibrazione, tutte le quattro curve di pressione considerate, riguardanti rapporti di compressione  $\beta = 9.5, 9.0, 8.0, 7.0$ . E' utile osservare come, al decrescere del rapporto di compressione, le curve di pressione simulate mostrino un comportamento che tende ad anticipare leggermente il picco di pressione in camera, rispetto al corrispondente dato sperimentale; questa differenza rimane tuttavia limitata a non più di  $4^\circ$  CA nel

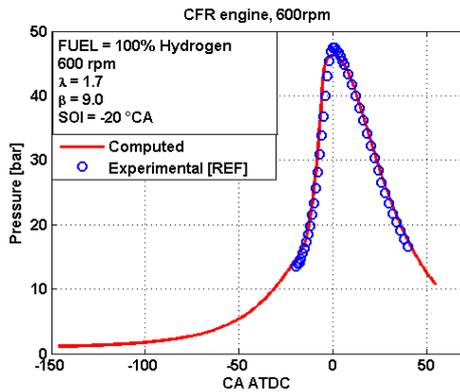


Figura 6: Calibrazione del modello di combustione per motore CFR alimentato ad idrogeno,  $n = 600\text{rpm}$ ,  $\lambda = 1.7$ ,  $\beta = 9.0$ .

caso peggiore.

La seconda validazione è stata effettuata sulla base di misurazioni sperimentali che prevedono un anticipo di accensione variabile:  $\theta_{SOI} = -20, -15, -12, -10^\circ\text{CA}$ . In questo caso, sono costanti su tutti i casi gli altri parametri operativi: rapporto di compressione  $\beta = 9.0$ , dosatura della miscela  $\lambda = 1.7$ , velocità di rotazione del motore  $n = 600\text{rpm}$ . I risultati del confronto numerico-sperimentale sono illustrati in figura 5: in questo caso si osserva un'ottima corrispondenza del dato numerico rispetto alle misurazioni sperimentali, che non mostra variazioni significative in termini di accuratezza all'interno dell'intervallo di anticipi di accensione considerati.

Per quanto riguarda la validazione del modello in termini di emissioni inquinanti, non è stato possibile attualmente eseguire un confronto numerico-sperimentale sulla base di dati dettagliati, e di conseguenza non si è potuto procedere a ricavare un valore ottimale della costante di calibrazione  $c_{NO}$  discussa precedentemente. Cionondimeno, si è provveduto a verificare, se non la capacità predittiva del modello in termini assoluti, in ogni caso la consistenza del suo funzionamento al variare della dosatura della miscela. Un insieme simulazioni è stato eseguito, per il caso tipico considerato per la calibrazione del modello di combustione, considerando un coefficiente correttivo per la formazione dell'ossido di azoto  $c_{NO} = 1.0$ . Il confronto è in questo caso stato effettuato considerando la unica variazione di dosatura della miscela, ed i risultati del calcolo

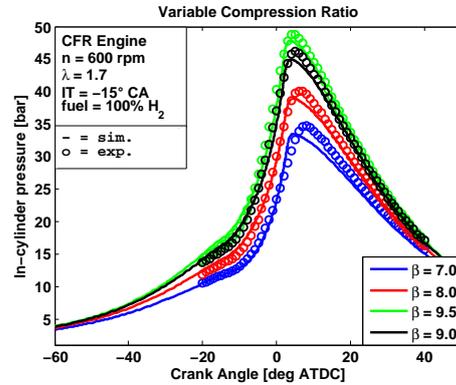


Figura 7: Confronto numerico-sperimentale: motore CFR,  $600\text{rpm}$ ,  $\lambda = 1.7$ ,  $IT = -15^\circ\text{CA}$ , rapporto di compressione variabile.

sono stati riportati in figura 5. In particolare, è possibile osservare come l'andamento simulato riprenda in modo molto accurato gli andamenti tipici di emissioni di NO per motori ad accensione comandata [29]. Per quanto riguarda i valori assoluti, riportati nel grafico in modo normalizzato, essi risultano poco significativi poiché in assenza di misurazioni sperimentali di riferimento.

## 6 Applicazione nel caso di ottimizzazione motore

Al fine di testare la applicabilità del modello di combustione sviluppato come strumento di ottimizzazione motore, si è proceduto ad accoppiarlo ad un codice di ottimizzazione genetico sviluppato dagli autori, e già precedentemente validato [54]. La descrizione dettagliata dell'algoritmo di ottimizzazione esula dallo scopo presente, e può comunque essere ritrovata in dettaglio in [54]. Per la ottimizzazione, si è scelta come condizione operativa di riferimento quella sfruttata per la calibrazione del modello di combustione e relativa ad un motore CFR, avente velocità di rotazione  $n = 600\text{rpm}$ , e rapporto di compressione  $\beta = 9.0$ . Al fine di poter visualizzare in modo semplice i risultati della ottimizzazione, si sono scelti solo due parametri operativi da ottimizzare: l'anticipo di accensione, variabile nell'intervallo  $\theta_{SOI} \in [-40, -5]^\circ\text{CA}$ ; la dosatura della miscela, variabile nell'intervallo  $\lambda \in [1.0, 2.0]$ . Per quanto riguarda la stima del merito della singola configurazione, si è adottata la formulazione di Yun e

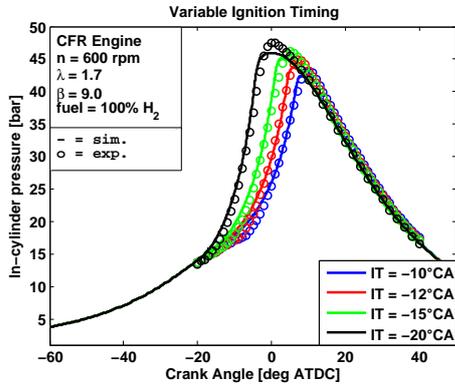


Figura 8: Confronto numerico-sperimentale: motore CFR, 600rpm,  $\lambda = 1.7$ ,  $\beta = 9.0$ , anticipo di accensione variabile.

Reitz [55], che prevede una formulazione della funzione di merito di tipo iperbolico, ed il raffronto delle prestazioni e delle emissioni inquinanti rispetto a valori di target (identificati con il pedice  $t$ ):

$$f(X) = \text{merito} = \frac{1000}{\left(\frac{NO}{NO_t}\right)^2 + \left(\frac{RIMEP_t}{RIMEP}\right)}; \quad (32)$$

nel caso corrente, quale parametro per quantificare le prestazioni motore, anziché il valore di pressione media indicata, si è adottato un valore di pressione media indicata 'ridotto' al solo intervallo angolare del ciclo simulato, a valvole chiuse.

In primo luogo, è stata lanciata una simulazione batch per la realizzazione di uno scenario di merito che coprisse tutto lo spazio degli stati consentito; un totale di  $71 \times 51 = 3621$  simulazioni è stato lanciato. I risultati di questo calcolo in termini di funzione di merito sono stati riportati in figura 10: è possibile osservare come lo spazio degli stati considerato preveda, per la funzione di merito, un massimo assoluto in corrispondenza di un anticipo di accensione  $\theta_{SOI}^0 = -5^\circ CA$ , e di una dosatura della miscela  $\lambda = 1.42$ . Successivamente, è stata eseguita una ottimizzazione genetica sui due parametri operativi variabili, per un totale di 10 generazioni, ciascuna di esse formata da 150 individui. Come parametri caratteristici della ottimizzazione genetica sono stati scelti una percentuale di popolazione da riprodurre tra una generazione e l'altra  $p_r = 0.80$ , una probabilità di mutazione dei cromosomi  $p_m = 0.20$  ed una probabilità di crossover dei cromosomi  $p_c = 0.40$ . Gli intervalli di

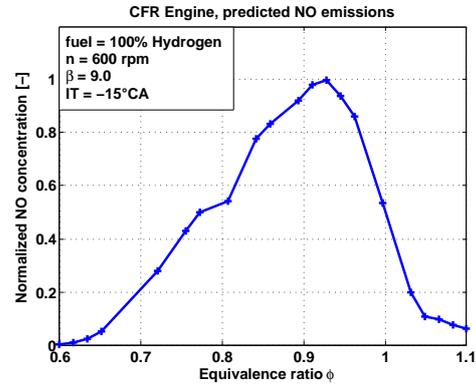


Figura 9: Diagramma di emissioni inquinanti calcolato per motore CFR, regime di rotazione  $n = 600 \text{ rpm}$ , anticipo di accensione  $\theta_{SOI} = -15^\circ CA$ , e dosatura della miscela variabile.

validità delle variabili sono stati suddivisi in un totale di 256 passi discreti ciascuno. Complessivamente, al termine della ottimizzazione sono stati simulati 1230 individui, pari ad una richiesta in termini computazionali inferiore del 65% circa rispetto alla simulazione dello scenario completo. Come risultato dell'ottimizzazione, è stato individuato l'individuo caratterizzato da un valore di anticipo di accensione  $\theta_{SOI}^{GA} = -5^\circ CA$ , e da un valore di dosatura  $\lambda = 1.4235$ . In figura 11 è mostrato lo scenario di comparazione tra l'ottimizzazione genetica ed il calcolo dettagliato di tutto lo spazio degli stati: come è possibile osservare, la prima generazione ricopre all'incirca uniformemente tutto lo spazio, mentre l'ultima generazione è ormai – di fatto, quasi completamente – accentrata attorno al punto di ottimo.

Il risultato dell'ottimizzazione portata a termine consente di concludere come, in via preliminare, lo strumento di calcolo sviluppato mostri una buona affidabilità anche in corrispondenza di variazioni decise delle condizioni operative simulate, e di conseguenza possa essere utilizzato come strumento robusto per una ottimizzazione efficiente.

## 7 Conclusioni e sviluppi futuri

Lo sviluppo, l'implementazione e la validazione di un modello predittivo, quasi-dimensionale, di combustione per la previsione del processo di combustione in motori endotermici alternativi alimentati ad idrogeno sono sta-

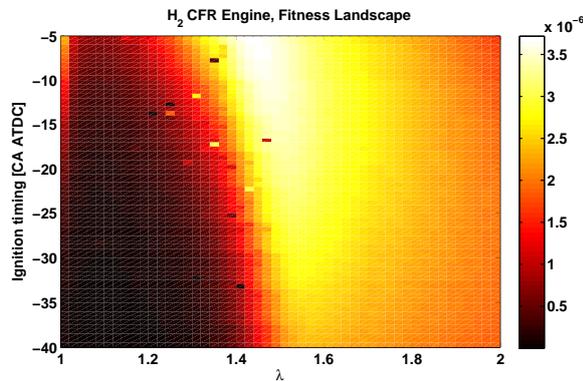


Figura 10: Scenario di merito delle configurazioni motore caratterizzate da anticipo di accensione  $\theta_{IT} \in [-40, -5]^\circ\text{CA}$ ; dosatura della miscela  $\lambda \in [1.0, 2.0]$ .

ti discussi nel presente lavoro. Il modello è fondato su di una struttura basata su un'analisi di primo principio della Termodinamica applicata ad un motore endotermico alternativo, all'interno della quale è stato sviluppato un insieme di sottomodelli per la rappresentazione dello spettro di turbolenza medio interno-cilindro, dello sviluppo e della propagazione del fronte di fiamma, dell'interazione tra fronte di fiamma e turbolenza in camera, dello scambio termico in parete, nonché del trattamento della composizione in equilibrio chimico dei gas combusti, e della formazione dei principali inquinanti. Il confronto tra la previsione numerica ed una serie di misurazioni sperimentali reperite in letteratura, inerenti un motore CFR standard, ha mostrato una generale buona affidabilità del modello sviluppato in termini di accordo tra le curve di andamento della pressione media interno-cilindro. Per quanto riguarda la formazione di inquinanti, nonostante la carenza di dati sperimentali a disposizione, si è potuta osservare una buona capacità del modello di catturare l'andamento delle emissioni di ossidi di azoto al variare della dosatura della miscela. Cionondimeno, si osserva per quanto riguarda quest'ultimo aspetto una mancanza di risoluzione del modello in corrispondenza di miscele molto magre: nel futuro prossimo, sarà consigliabile sviluppare ulteriormente il modello di combustione prevedendo, ad esempio, una suddivisione della carica bruciata in più di una zona, oltre che un meccanismo di formazione dell'ossido di azoto che consideri anche lo schema di Fenimore. Infine, possono essere tratte alcune conclusioni, che mostrano anche le idee per i possibili sviluppi futuri del

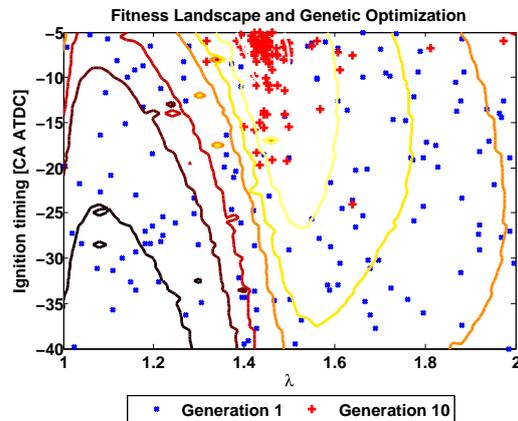


Figura 11: Risultati ottimizzazione motore confrontati con lo scenario di merito complessivo: distribuzione degli individui afferenti alla prima ed all'ultima generazione simulate.

modello:

- Nonostante le limitazioni intrinseche possedute dal modello di combustione quasi-dimensionale, sono state ottenute previsioni molto accurate in termini di prestazioni motore, grazie all'adozione di sottomodelli affidabili e già validati in letteratura per la simulazione della combustione turbolenta premiscelata;
- La correlazione per il calcolo della velocità di combustione laminare delle miscele aria-idrogeno adottata si è mostrata abbastanza accurata, anche dopo la validazione in condizioni operative differenti. Tuttavia, ulteriori verifiche debbono essere condotte per validarne la capacità predittiva in corrispondenza di rapporti di equivalenza estremi. Un possibile lavoro futuro può consistere nello sviluppo di un codice per il calcolo di fiamme laminari premiscelate, e la implementazione all'interno del modello di combustione di tabelle di riscontro dettagliate per la stima delle velocità di combustione laminari;
- La previsione delle emissioni inquinanti è risultata essere promettente, dal momento che il modello sviluppato per il calcolo delle emissioni di NO è ha mostrato di catturare con un buon grado di affidabilità l'andamento di queste emissioni al variare della dosatura della miscela; tuttavia, occorre ef-

fettuare una validazione più dettagliata, che veda raffrontati questi valori con misurazioni condotte sperimentalmente. In particolare appare migliorabile il modello di formazione degli NO mediante l'introduzione del meccanismo di Fenimore, che tenga conto della formazione di ossidi di azoto in corrispondenza di miscele molto magre ed a basse temperature. Un secondo miglioramento può consistere nello sviluppo di una formulazione a zone di gas combustibili multiple [48]: l'adozione di un modello simile consentirebbe una rappresentazione migliore dei gradienti di temperatura interni al cilindro, e potrebbe quindi migliorare la stima della previsione delle emissioni inquinanti.

- La robustezza e l'affidabilità delle previsioni mostrate dal modello, anche qualora applicato ad un caso di ottimizzazione motore, ne mostrano le potenzialità quale strumento efficiente e computazionalmente poco esigente per l'investigazione del funzionamento dei motori endotermici alternativi alimentati ad idrogeno.

**Nomenclature**

$[\ ]$	concentrazione molare [ $mol/cm^3$ ]	$k_f, k_b$	coefficienti di reazione in avanti e all'indietro
$A, B, E, F, G$	costanti velocità di combustione laminare[10]	$k_B$	costante universale di Boltzmann [J/K]
$A$	area [ $m^2$ ]	$m$	massa [kg]
$C$	costante [-]	$n$	velocità di rotazione dell'albero motore [rpm], numero di moli [mol]
$D_3$	dimensione frattale di una superficie tridimensionale	$p$	pressione [Pa]
$D_t$	diffusività turbolenta	$s$	corsa [m]
$K_p$	costante di equilibrio chimico	$t$	tempo [s]
$L$	lunghezza [m]	$u$	energia interna specifica [ $J kg^{-1}$ ]
$L_I$	Scala integrale di turbolenza [m]	$u$	velocità [ $m/s$ ]
$L_K$	Scala di turbolenza di Kolmogorov [m]	$u_L$	velocità di combustione laminare con stiramento [ $m/s$ ]
$L_T$	micro-scala di turbolenza di Taylor [m]	$x$	frazione molare
$N_s$	insieme di specie	$y$	frazione in massa
$Q$	energia termica [J]	<b>Greek letters</b>	
$Re_t$	numero di Reynolds turbolento	$\alpha$	rappporto aria-combustibile (in massa) [-]
$R_m$	costante specifica di una miscela di gas perfetti [ $J kg^{-1} K^{-1}$ ]	$\beta$	rappporto di compressione [-]
$R_u$	costante universale dei gas [ $J K^{-1} mol^{-1}$ ]	$\Delta g^\circ$	variazione di energia libera di Gibbs
$S_L$	velocità di combustione laminare [m/s]	$\varepsilon$	emissività di corpo grigio [-]
$T$	temperatura [K]	$\eta$	viscosità molecolare [ $\mu P$ ]
$U$	energia interna [J]	$\gamma$	coefficiente di correlazione della frazione di residui sulla velocità di combustione laminare [20]
$V$	volume [ $m^3$ ]	$\nu$	coefficiente di reazione stechiometrico
$W$	lavoro [J]	$\Omega^{(2,2)}$	integrale di collisione
$W$	peso molecolare [kg/kmol]	$\phi$	rappporto di equivalenza della
$a$	coefficiente di interpolazione polinomiale	$\Psi$	rappporto molare tra prodotti e reagenti
$c_p$	calore specifico a pressione costante [ $J kg^{-1} K^{-1}$ ]	$\rho$	densità [ $kg/m^3$ ]
$c_v$	calore specifico a volume costante [ $J kg^{-1} K^{-1}$ ]	$\sigma_0$	costante universale di Stefan-Boltzmann [ $J m^{-2} K^{-4} s^{-1}$ ]
$f$	frazione ( $f \in [0, 1]$ )	$\sigma$	diametro di collisione di Lennard-Jones [Å]
$h$	entalpia specifica [J/kg]	$\tau$	costante di tempo [s]

$\theta$  angolo di manovella [ $^{\circ}$ CA]

$\vartheta$  variabile generica

### Superscripts

' fluttuazione turbolenta RMS

- media temporale

$\alpha$  esponente di correlazione della temperatura [20]

$\beta$  esponente di correlazione della pressione [20]

$m, n$  esponenti di correlazione della massa di combustibile [10]

$o$  condizioni iniziali

### Subscripts

0 condizione di riferimento

$a$  apparente

$air$  aria standard

$b$  combustione, zona di gas combusti

$eq$  condizioni di equilibrio chimico

$F$  combustibile

$f$  fiamma, fronte di fiamma

$H_2$  idrogeno

$K$  Kolmogorov

max massimo

min minimo

$p$  pistone

$r$  scambio termico radiativo

$res$  gas residui

$s$  stechiometrico

$t$  turbolento

$te$  entrainment turbolento

$tot$  totale interno cilindro

$t, t$  in sviluppo turbolento

$u$  zona di miscela fresca

$w$  parete

### Abbreviations

ATDC after top dead center

BTDC before top dead center

CA crank angle degrees

CFR Cooperative Fuel Research

EVO apertura della valvola di

ICE motore a combustione interna

IVC chiusura della valvola di aspirazione

$NO_x$  ossidi di azoto ( $NO$ ,  $NO_2$ )

SI spark ignition

SOI start of ignition

TDC top dead center

## Riferimenti bibliografici

- [1] Hu E, Huang Z, Zheng J, Li Q, He J. Numerical study on laminar burning velocity and NO formation of premixed methane-hydrogen-air flames. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:6545-6557.
- [2] Matthews RD, Chin Y-W. A Fractal-Based SI Engine Model: Comparisons of Predictions with Experimental Data. SAE technical paper 910079, 1991.
- [3] Verhelst S, Sheppard CGW. Multi-zone thermodynamic modelling of spark-ignition engine combustion - An overview. *Energy Conversion and Management* 2009;50:1326-1335.
- [4] Hu E, Huang Z, He J, Jin C, Zheng J. Experimental and numerical study on laminar burning characteristics of premixed methane-hydrogen-air flames. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:4876-4888.
- [5] Huang Z, Zhang Y, Zeng K, Liu B, Wang Q, Jiang D. Measurements of laminar burning velocities for natural gas-hydrogen-air mixtures. *Comb Flame* 2006;46:302-311.

- [6] Rakopoulos CD, Michos CN. Generation of combustion irreversibilities in a spark ignition engine under biogas–hydrogen mixtures fueling. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:4422-4437.
- [7] D'Errico G. Prediction of the combustion process and emission formation of a bi-fuel s.i. engine. *Energy Conversion and Management* 2008;49:3116-3128.
- [8] Kee RJ, Dixon-Lewis G, Warnatz J, Coltrin ME, Miller JA, Moffat HK. A FORTRAN computer code package for the evaluation of gas-phase, multicomponent transport properties. Sandia National Laboratories Report SAND86-8246, 1986.
- [9] Karim GA, Wierzba I, Al-Alousi Y. Methane-hydrogen mixtures as fuels. *Int J Hydrogen Energy* 1996;7:625-631.
- [10] Muller UC, Bollig M, Peters N. Approximations for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames. *Comb Flame* 1997;108:349-356.
- [11] Ma F, Wang Y, Wang M, Liu H, Wang J, Ding S, Zhao S. Development and validation of a quasi-dimensional combustion model for SI engines fuelled by HCNG with variable hydrogen fractions. *Int J Hydrogen Energy* 2008;33:4863-4875.
- [12] Keck JC. Turbulent flame structure and speed in spark-ignition engines. *Proceedings of the Nineteenth Symposium (International) on Combustion*. The Combustion Institute 1982, 1451-1466.
- [13] Linstrom PJ, Mallard WG. The NIST Chemistry WebBook: A Chemical Data Resource on the Internet. *J. Chem. Eng. Data*, 2001, 46 (5), pp. 1059-1063.
- [14] Warnatz J, Maas U, Dibble, RW. *Combustion*, 4th edition. Springer-Verlag, 2006.
- [15] McQuarrie DA. *Statistical Mechanics*, 2nd Edition. University Science Books, 2000.
- [16] Brokaw RS. *Viscosity of Gas Mixtures*. NASA Technical Note TN D-4496, 1968.
- [17] Bauer CG, Forest TW. Effect of hydrogen addition on the performance of methane-fueled vehicles. Part I: effect on S.I. engine performance. *Int J Hydrogen Energy* 2001;26:55-70.
- [18] Bauer CG, Forest TW. Effect of hydrogen addition on the performance of methane-fueled vehicles. Part II: driving cycle simulations. *Int J Hydrogen Energy* 2001;26:71-90.
- [19] Rakopoulos CD, Hountalas DT, Tzanos EI, Taklis GN. A fast algorithm for calculating the composition of diesel combustion products using 11 species chemical equilibrium scheme. *Advances in Engineering Software* 1994;19:109-119.
- [20] Verhelst S, Woolley R, Lawes M, Sierens R. Laminar and unstable burning velocities and Markstein lengths of hydrogen–air mixtures at engine-like conditions. *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), 209-216.
- [21] Qin X, Kobayashi H, Niioka T. Laminar burning velocity of hydrogen-air premixed flames at elevated pressure. *Experimental Thermal and Fluid Science* 21 (2000), 58-63.
- [22] Verhelst S. A Study of the Combustion in Hydrogen-Fuelled Internal Combustion Engines. PhD Thesis, Ghent University, 2005. <http://hdl.handle.net/1854/3378>
- [23] Karim GA, Wierzba I, Al-Alousi Y. Methane-hydrogen mixtures as fuels. *Int J Hydrogen Energy* 1996;21:625-631.
- [24] Hu E, Huang Z, Zheng J, Li Q, He J. Numerical study on laminar burning velocity and NO formation of premixed methane-hydrogen-air flames. *Int J Hydrogen Energy* 2009;34:6545-6557.
- [25] Gu XJ, Haq MZ, Lawes M, Woolley R. Laminar Burning Velocity and Markstein Lengths of Methane–Air Mixtures. *Combustion and Flame* 2000;121:41-58.
- [26] Stone R, Clarke A, Beckwith P. Correlations for the Laminar-Burning Velocity of Methane/Diluent/Air Mixtures Obtained in Free-Fall Experiments. *Combustion and Flame* 1998;114:546-555.
- [27] Di Sarli V, Di Benedetto A. Laminar burning velocity of hydrogen-methane/air premixed flames. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:637-646.
- [28] D'Errico G, Ferrari G, Onorati A, Cerri T. Modeling the Pollutant Emissions from a S.I. Engine. SAE technical paper 2002-01-0006, 2002.

- [29] Heywood JB. *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw Hill, 1998.
- [30] Verhelst S, Sierens R. A quasi-dimensional model for the power cycle of a hydrogen-fuelled ICE. *Int J Hydrogen Energy* 2007;32:3545-3554.
- [31] Benson RS, Annand WJD, Baruah PC. A simulation model including intake and exhaust systems for a single cylinder four-stroke cycle spark ignition engine. *Int J Mech Sci* 1975;17:97-124.
- [32] Peters N, Williams FA. The asymptotic structure of stoichiometric methane-air flames. *Combustion and Flame* 1987;68:185-207.
- [33] Smith JR. Turbulent flame structure in a homogeneous-charge engine. SAE technical paper 820043, 1982.
- [34] Blizzard NC, Keck JC. Experimental and Theoretical Investigation of Turbulent Burning Model for Internal Combustion Engines. SAE technical paper 740191, 1974.
- [35] Tabaczynski RJ, Ferguson CR, Radhakrishnan K. A turbulent entrainment model for spark-ignition engine combustion. SAE technical paper 770647, 1977.
- [36] Tabaczynski RJ, Trinker FH, Shannon BAS. Further refinement and validation of a turbulent flame propagation model for spark-ignition engines. *Combustion and Flame* 1980;39:111-121.
- [37] Hamori F. Exploring the Limits of Hydrogen Assisted Jet Ignition. PhD Thesis, Melbourne University, 2006.
- [38] Poulos SG, Heywood JB. The Effect of Combustion Chamber Geometry on Spark-Ignition Engine Combustion. SAE technical paper 830334, 1983.
- [39] Gülder ÖL, Smallwood GJ. Inner Cutoff Scale of Flame Surface Wrinkling in Turbulent Premixed Flames. *Combustion and Flame* 1995;103:107-114.
- [40] Mantzaras J, Felton PG, Bracco FV. Fractals and turbulent premixed engine flames. *Combustion and Flame* 1989;77:295-310.
- [41] Bozza F, Gimelli A, Merola SS, Vaglieco B. Validation of a Fractal Combustion Model Through Flame Imaging. SAE technical paper 2005-01-1120, 2005.
- [42] Liou D, North GL, Santavicca DA. A fractal model of turbulent flame kernel growth. SAE technical paper 900024, 1990.
- [43] Hall MJ, Bracco FV. A study of velocities and turbulence intensities measured in firing and motored engines. SAE technical paper 870453, 1987.
- [44] Bade Shrestha SO, Karim GA. Predicting the effects of the presence of diluents with methane on spark ignition engine performance. *Applied Thermal Engineering* 2001;21:331-342.
- [45] Assanis DN, Heywood JB. Development and Use of a Computer Simulation of the Turbocompounded Diesel System for Engine Performance and Component Heat Transfer Studies. SAE technical paper 860329, 1986.
- [46] Woschni G. A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine. SAE technical paper 670931, 1967.
- [47] Sierens R, Rosseel E. Variable Composition Hydrogen/Natural Gas Mixtures for Increased Engine Efficiency and Decreased Emissions. *J Eng Gas Turbines Power* 2000;122:135-40.
- [48] Rakopoulos CD, Michos CN. Development and validation of a multi-zone combustion model for performance and nitric oxide formation in syngas fueled spark ignition engine. *Energy Conversion and Management* 2008;49:2924-2938.
- [49] Bade Shrestha SO, Karim GA. Hydrogen as an additive to methane for spark ignition engine applications. *Int J Hydrogen Energy* 1999;24:577-586.
- [50] Akansu SO, Dulger Z, Kahraman N, Veziroglu TN. Internal combustion engines fueled by natural gas-hydrogen mixtures. *Int J Hydrogen Energy* 2004;29:1527-1539.
- [51] Lipatnikov AN, Chomiak J. Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations. *Progress in Energy and Combustion Science* 2002;28:1-74.

- [52] Tabaczynski RJ, Ferguson CR, Radhakrishnan K. A Turbulent Entrainment Model for Spark-Ignition Engine Combustion. SAE technical paper 770647, 1977.
- [53] Lipatnikov AN, Chomiak J. A simple model of unsteady turbulent flame propagation. SAE technical paper 972993, 1997.
- [54] Mattarelli E, Perini F, Rinaldini CA. Optimization of a Supercharged Single Cylinder Engine for a Formula SAE Racing Car. SAE technical paper 2009-01-0309, 2009.
- [55] Yun H, Reitz RD. Combustion optimization in the low-temperature diesel combustion regime. International Journal of Engine Research 6 (2005), 513-524.