Politecnico di Torino

Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica

Tesi di Laurea di II livello

Analisi diagnostica della combustione magra di idrogeno in un motore a combustione interna LD

Relatori:
Prof.ssa Daniela Anna Misul
Prof. Mirko Baratta

Candidato:
Michele Rinaldi S315773

Anno Accademico 2024/25

Abstract

La riduzione delle emissioni inquinanti nel settore dei trasporti rappresenta una delle principali sfide per la transizione verso una mobilità sostenibile. Tra le varie soluzioni, l'idrogeno emerge come un'alternativa promettente grazie alla sua capacità di azzerare le emissioni di CO, HC e PM, oltre a ridurre sensibilmente gli NOx in condizioni di combustione magra.
Questo lavoro si concentra sull'analisi della combustione magra di idrogeno in un motore a combustione interna. L'obiettivo principale è stato ampliare le funzionalità di un software diagnostico esistente integrando la possibilità di simulare la combustione interamente alimentata a idrogeno. In precedenza, lo strumento supportava unicamente combustibili convenzionali come benzina, metano e relative miscele con idrogeno. Per raggiungere tale scopo, sono state apportate modifiche al codice relativo al calcolo delle proprietà chimiche della miscela nelle fasi pre- e post-combustione, superando i vincoli del modello precedente che richiedeva la presenza di idrocarburi. Inoltre, è stata ottimizzata la gestione dei dati di input, in particolare la lettura dei valori di pressione in camera da file esterni, fondamentali per l'intero processo di simulazione.
Il modello di combustione utilizzato è il Multizone Burning Rate Analysis, implementato all'interno di un software sviluppato dal gruppo di ricerca del DENERG PoliTo-Engine Research Center (Politecnico di Torino). Oltre ai parametri fondamentali come la temperatura in camera di combustione, la velocità di combustione e le emissioni di NOx, il modello è in grado di calcolare la Heat Release Rate (HRR) e la frazione di massa bruciata.
La validazione del software è stata condotta tramite simulazioni su specifici punti operativi del motore, utilizzando segnali di pressione in camera precedentemente acquisiti da prove sperimentali. Lo sviluppo è stato realizzato sulla piattaforma di sviluppo NI LabWindows/CVI in linguaggio C.
Grazie a tali aggiornamenti, il programma è ora in grado di supportare simulazioni progettuali di motori alimentati a idrogeno, fornendo dati essenziali quali temperatura in camera, velocità di combustione ed emissioni di NOx.

Indice

Indice **4**

Elenco delle figure **6**

Elenco delle tabelle **7**

1 Introduzione **8**
1.1 Dati sperimentali 9

2 Multizone Burning Rate Analysis **11**
2.1 Dati in input 11
2.2 Struttura generale 12
2.2.1 Modello multizona quasi-dimensionale 12
2.2.2 Angolo di inizio combustione 16
2.2.3 Procedura CAD, scambi termici e velocità di combustione 16
2.2.4 Modello di formazione degli NOx 18
2.3 Modelli di calcolo delle composizioni di burned ed unburned gas 22
2.3.1 Modello per la combustione di un generico combustibile a base idrocarburica 22
2.3.2 Modello per la combustione di un combustibile 100% H_2 28

3 Validazione e Risultati **32**
3.1 100% H_2 33
3.2 Analisi comparative dei risultati ottenuti 46
3.2.1 Effetti della presenza di CO_2 nella combustione dell'idrogeno 46
3.2.2 Confronto a Velocità angolare costante 55
3.2.3 Analisi della sensibilità del modello alla riduzione dell'Angolo di ampiezza zona 57

3.2.4 Confronto tra le emissioni di NO_X calcolate e i valori sperimentali 59

4 Conclusioni e Sviluppi Futuri **61**

Elenco delle figure

2.1 Divisione della camera di combustione in zone burned e unburned . . . 13
2.2 Superficie che contiene al suo interno tutti i burned gas 18
2.3 Costanti di Miller per il calcolo delle velocità di reazione . . . 20
2.4 Rapporto tra gli NO prompt e la concentrazione all'equilibrio in funzione del rapporto di equivalenza ϕ . . . 21

3.1 Mass Fraction Burned x_b, combustione 100% H_2 . . . 35
3.2 Heat Release Rate HRR, combustione 100% H_2 . . . 38
3.3 u_b, S_b, u_g, combustione 100% H_2 . . . 40
3.4 Temperature dei burned gas T_b, combustione 100% H_2 43
3.5 Emissioni di NO_X, combustione 100% H_2 . . . 45
3.6 Mass Fraction Burned x_b, confronto composizione combustibile 47
3.7 Heat Release Rate HRR, confronto composizione combustibile 49
3.8 Temperature dei burned gas T_b, confronto composizione combustibile . . . 51
3.9 Emissioni di NO_X, confronto composizione combustibile . . . 52
3.10 Confronto per velocità angolare $n_{rpm} = 1500rpm$, combustione 100% H_2 . . . 56
3.11 Confronto per angolo ampiezza zona . . . 59
3.12 Confronto tra le emissioni di NO_X calcolate dal modello e i valori misurati sperimentalmente . . . 60

Elenco delle tabelle

1.1 Punti operativi motore 10

2.1 Composizione dei burned gas in assenza di dissociazione, per reazione di combustione in forma estesa 27
2.2 Composizione degli unburned gas, per reazione di combustione in forma estesa 27
2.3 Composizione degli unburned gas, per reazione di combustione in forma estesa, in assenza di idrocarburi 31

3.1 Coefficienti moltiplicativi equazione di combustione in forma estesa 2.49 33
3.2 Proprietà chimiche del combustibile e parametri ϵ^*, ϕ^* e ψ^* . . 33
3.3 Parametri di calibrazione C_0 e C_2, combustione 100% H_2 . . . 33
3.4 Parametri di combustione 100% H_2 45

Capitolo 1

Introduzione

Negli ultimi anni, la necessità di una transizione verso un futuro energetico sostenibile ha acquisito un'importanza crescente a livello globale, sia per i governi che per l'opinione pubblica. Il settore dell'energia, elemento centrale di questo cambiamento, è chiamato a sviluppare soluzioni innovative per garantire un approvvigionamento energetico efficiente e a basso impatto ambientale. Ad oggi, la produzione energetica mondiale si basa ancora in larga misura sui combustibili fossili, apprezzati per la loro economicità e disponibilità. Tuttavia, questi ultimi non solo contribuiscono in modo significativo alle emissioni di gas serra, ma sono anche risorse limitate.

I veicoli alimentati a combustibili fossili, infatti, sono tra i principali responsabili dell'emissione di gas serra e inquinanti atmosferici, tra cui anidride carbonica (CO2), ossidi di azoto (NOx), monossido di carbonio (CO) e particolato fine (PM). Questi inquinanti hanno effetti negativi sulla qualità dell'aria e sulla salute umana, causando problemi respiratori e cardiovascolari, oltre a contribuire al cambiamento climatico. Inoltre, con la crescita della popolazione e l'aumento della domanda di mobilità nei paesi in via di sviluppo, le emissioni derivanti dai trasporti sono destinate ad aumentare ulteriormente, rendendo ancora più urgente la necessità di soluzioni a basso impatto ambientale.

In questo scenario, l'idrogeno si configura come un elemento chiave per la transizione energetica, offrendo un'alternativa pulita e versatile per il settore della mobilità. Sebbene l'elettrificazione mediante batterie rappresenti una soluzione efficace per i veicoli leggeri, essa presenta limitazioni in termini di autonomia e tempi di rifornimento, specialmente per i trasporti pesanti e a lunga percorrenza. L'idrogeno, grazie alla sua elevata densità energetica e alla possibilità di essere rifornito rapidamente, rappresenta una soluzione ideale per queste applicazioni.

Le due principali tecnologie basate sull'idrogeno sono le celle a combu-

stibile e i motori a combustione interna a idrogeno. Le celle a combustibile trasformano l'idrogeno in elettricità senza produrre emissioni nocive, con un'efficienza energetica superiore rispetto ai motori convenzionali. I motori a combustione interna a idrogeno, invece, possono ridurre significativamente le emissioni di CO2 rispetto ai combustibili fossili, ma producono ancora quantità limitate di ossidi di azoto, rendendo necessario lo sviluppo di sistemi di abbattimento degli NOx. Per ovviare a questo problema, la ricerca scientifica si è concentrata sulla combustione di idrogeno in miscele estremamente povere, poiché in queste condizioni si riducono le temperature di picco dei gas combusti e la concentrazione di NOx si congela prima nella fase di espansione dopo il PMS [1]. Inoltre, l'uso dell'idrogeno nei trasporti, a differenza dei carburanti fossili, riduce drasticamente le emissioni di particolato fine e non produce idrocarburi incombusti, anidride solforosa (SOx) e monossido di carbonio (CO), migliorando così significativamente la qualità dell'aria nelle città e nelle zone ad alta densità di traffico. Perciò, la ricerca e lo sviluppo di motori a combustione interna alimentati a idrogeno rappresentano un passo cruciale verso una mobilità sostenibile.

In questo contesto, uno degli aspetti fondamentali è l'analisi approfondita dei dati sperimentali raccolti durante i test al banco prova. Un'analisi dettagliata consente di affinare i processi di calibrazione e ottimizzare i parametri operativi, migliorando così l'efficienza e le prestazioni del motore. Perciò, l'obiettivo di questo studio è lo sviluppo e l'applicazione di strumenti avanzati di diagnostica della combustione, basati principalmente sull'analisi dei segnali di pressione, per valutare le caratteristiche della combustione nei motori a idrogeno.

1.1 Dati sperimentali

Il motore utilizzato per questo studio è un monocilindrico da 0,5 L alimentato a idrogeno, dotato di tecnologia a iniezione diretta. Il sistema di combustione è stato modificato partendo da una configurazione basata su un motore diesel, con un adattamento mirato all'utilizzo dell'idrogeno. Il sensore di pressione è stato installato in sostituzione della candela, consentendo un monitoraggio accurato della combustione.

Il sistema di acquisizione dati registra 200 cicli consecutivi per ciascun punto operativo del motore, raccogliendo 200 serie temporali della pressione in camera di combustione durante il funzionamento reale. L'acquisizione avviene con una risoluzione di 0,1 gradi di angolo di manovella (Crank Angle degree, CA), garantendo un elevato livello di dettaglio nell'analisi della combustione.

I punti operativi del motore analizzati in questa ricerca sono i seguenti [2]:

N°	**Engine speed [RPM]**	**IMEP [bar]**	**Lambda [-]**	**SA [CA deg bTDCf]**	**EGR [%]**
1)	1500	12.40	2.29	6.0	0
2)	1500	12.75	2.29	10.0	0
3)	1500	13.10	2.28	13.6	0
4)	1500	13.19	2.29	17.2	0
5)	2000	20.40	2.28	18.7	0
6)	3000	15.90	2.20	14.5	0
7)	3000	17.15	2.20	24.0	0
8)	3000	12.50	2.30	21.4	15
9)	3000	20.50	1.83	12.8	15

Tabella 1.1: Punti operativi motore

Capitolo 2

Multizone Burning Rate Analysis

La metodologia su cui si basa il modello di analisi diagnostica della combustione sviluppato precedentemente dal gruppo di ricerca del DENERG PoliTo-Engine Research Center (Politecnico di Torino) impiega il segnale di pressione in camera di combustione in un'analisi di primo principio per calcolare una serie di grandezze come i parametri di combustione (HRR, MFB, angoli caratteristici), i parametri termodinamici (temperature e coefficienti di scambio termico) ed i parametri energetici (efficienza della combustione).

Il modello sviluppato viene poi accoppiato ad una procedura CAD che descrive l'evoluzione della superficie dei gas combusti, per ottenere una valutazione quantitativa accurata delle velocità caratteristiche della loro espansione. Inoltre, l'incorporazione di una routine per il calcolo della concentrazione istantanea di NOx in camera secondo il meccanismo 'termico' di Zeldovich a sei equazioni e quello 'prompt' di Fenimore, permette un'analisi dettagliata dei meccanismi di formazione di questo inquinante estremamente sensibile alla temperatura locale e alla concentrazione di ossigeno nei gas combusti [3].

2.1 Dati in input

Come già detto in precedenza, essendo un Pressure-Based Diagnostic Tool, l'input principale è il segnale di pressione misurato all'interno del cilindro (opportunamente filtrato per ridurre i disturbi ad alta frequenza).

A questo vanno aggiunti i parametri legati alle condizioni operative del singolo punto motore su cui si basa la misurazione sperimentale della pressione, ovvero:

- velocità di rotazione del motore
- percentuale in massa di H2, CO e HC nei gas combusti, per il calcolo dell'efficienza di combustione
- portata di combustibile iniettato
- pressione e temperatura dell'ambiente di aspirazione
- pressione di sovralimentazione e temperatura a monte della turbina
- dosatura relativa λ
- percentuale di Exhaust Gas Recirculation (EGR)
- anticipo d'accensione (SA) rispetto al PMS

Tutti questi dati vengono caricati tramite file .txt e opportunamente letti dal programma.

2.2 Struttura generale

In questa sezione viene fornita una panoramica generale sul funzionamento del Multizone Burning Rate Analysis, illustrando le ipotesi adottate e le equazioni impiegate nei diversi modelli di calcolo implementati [4].

2.2.1 Modello multizona quasi-dimensionale

Il gas all'interno della camera di combustione è suddiviso in due regioni distinte: quella dei gas incombusti (unburned gas) e quella dei gas combusti (burned gas), quest'ultima ulteriormente frazionata in più zone, Fig. 2.1. Ogni zona viene creata a specifici angoli di manovella e rimane isolata dalle altre, impedendo la mescolanza e consentendo la formazione di gradienti di temperatura all'interno della camera.

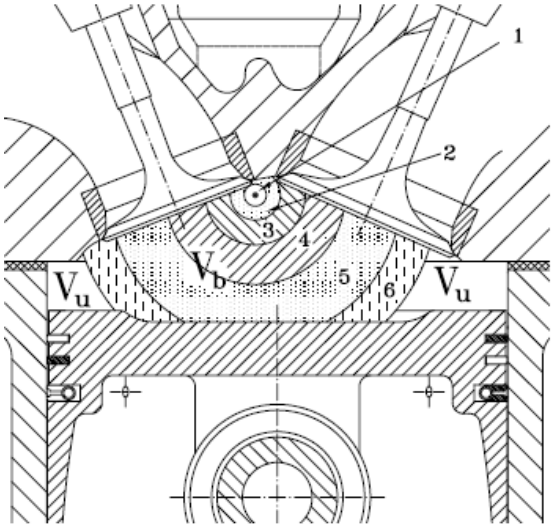


Figura 2.1: Divisione della camera di combustione in zone burned e unburned

Adottando l'approccio convenzionale per l'analisi termodinamica della combustione nei motori ad accensione comandata (SI engines), il modello si basa sull'elaborazione della pressione misurata all'interno del cilindro e sull'applicazione dei principi di conservazione e della legge dei gas perfetti alle regioni di gas incombusti e combusti.

Le equazioni di base del modello sono formulate in forma differenziale rispetto all'intervallo di tempo $dt = d\theta/\omega$.

Indicando con il pedice i ciascuna delle zone burned e con il pedice n l'ultima zona generata, possiamo scrivere un'equazione che lega la variazione istantanea del volume del cilindro con la somma dei volumi delle zone burned e unburned:

$$dV_u + \sum_{i=1}^{n-1} dV_{b,i} + dV_{b,n} = dV \tag{2.1}$$

L'equazione di conservazione della massa all'interno del cilindro è:

$$dm = d(m_f + m_a + m_r) = dm_u + dm_{b,n} = 0 \tag{2.2}$$

con f, a e r che indicano rispettivamente la massa di combustibile, aria e gas residui.

Introducendo la frazione di massa bruciata $x_b = m_b/m$:

$$m_b = x_b m, \quad m_u = (1 - x_b)m \tag{2.3}$$

$$x_b = \sum_{i=1}^{n} x_{b,i} \tag{2.4}$$

Perciò, la massa di ognuna delle zone burned è data dall'equazione $m_{b,i} = x_{b,i}m$. L'equazione di conservazione dell'energia per la zona unburned può essere scritta:

$$-q_u A_u \frac{d\theta}{\omega} - pdV_u = m_u du_u - pv_u dm_u = (1 - x_b)mdu_u + mdx_{b,n}R_u T_u \quad (2.5)$$

La legge dei gas perfetti in forma differenziale per la zona unburned viene espressa da:

$$pdV_u = -V_u dp + (1 - x_b)md(R_u T_u) - R_u T_u mdx_{b,n} \quad (2.6)$$

Sostituendo l'eq (2.6) nella (2.5), semplificando pdV_u e ricordando che per definizione $d(u_u + R_u T_u) = di_u$, si ottiene:

$$-q_u A_u \frac{d\theta}{\omega} + V_u dp = (1 - x_b)mdi_u \quad (2.7)$$

$q_u A_u$ esprime il flusso termico dalla zona degli unburned gas verso le pareti della camera di combustione e verso l'ultima zona burned. Tuttavia, come in qualsiasi approccio termodinamico, vengono considerati gli effetti globali piuttosto che quelli locali. Di conseguenza, nella stima della temperatura media dei gas incombusti, lo scambio termico locale tra burned e unburned gas può essere trascurato rispetto al trasferimento di calore tra gas e pareti, a causa delle diverse scale temporali coinvolte. Quindi, nell'equazione di conservazione dell'energia (2.7), $q_u A_u$ rappresenta il flusso termico totale che gli unburned gas scambiano con le pareti della camera di combustione.

Per ogni zona burned i, l'equazione di conservazione dell'energia si scrive:

$$-q_{b,i} A_{b,i} \frac{d\theta}{\omega} - pdV_{b,i} = d\left(m_{b,i} u_{b,i}\right) \quad (2.8)$$

Considerando che $dm_{b,i} = 0$ e introducendo la legge dei gas perfetti in forma differenziale per i burned gas:

$$pdV_{b,i} = -V_{b,i} dp + mx_{b,i} d\left(R_{b,i} T_{b,i}\right) \quad (2.9)$$

l'eq (2.8) diventa:

$$-q_{b,i} A_{b,i} \frac{d\theta}{\omega} + V_{b,i} dp = mdx_{b,i} di_{b,i} \quad (2.10)$$

L'equazione di conservazione totale all'interno del cilindro si scrive:

$$\begin{aligned} -qA\frac{d\theta}{\omega} - pdV = d(m_b u_b + m_u u_u) = (1 - x_b)mdu_u - \\ - u_u mdx_{b,n} + m\sum_{i=1}^{n} x_{b,i} du_{b,i} + mu_{b,n} dx_{b,n} \end{aligned} \quad (2.11)$$

Introducendo il flusso termico mediato sulla superficie:

$$q = q_u \frac{A_u}{A} + q_b \frac{A_b}{A} = q_u \frac{A_u}{A} + \sum_{i=1}^{n} q_{b,i} \frac{A_{b,i}}{A} \tag{2.12}$$

e la legge dei gas perfetti su tutta la regione dei burned gas:

$$pdV_b = -V_b dp + \sum_{i=1}^{n} m x_{b,i} d\left(R_{b,i} T_{b,i}\right) + m R_{b,n} T_{b,n} dx_{b,n} \tag{2.13}$$

è possibile riscrivere l'eq (2.11) come:

$$-(q_u A_u + q_b A_b)\frac{d\theta}{\omega} + V dp = d(m_b u_b + m_u u_u) = (i_{b,n} - i_u) m dx_{b,n} + (1 - x_b) m di_u + \\ + m \sum_{i=1}^{n} x_{b,i} di_{b,i} \tag{2.14}$$

Separando il contributo della zona burned più recente da quello delle zone burned precedentemente formate, il volume totale della camera di combustione può essere riscritto:

$$V = V_u + \sum_{i=1}^{n-1} V_{b_j} + V_{b_n} = m_u v_u + \sum_{i=1}^{n-1} m_{b_j} v_{b_j} + m_{b_n} v_{b_n} \tag{2.15}$$

e, grazie alle equazioni (2.3) e (2.4), la frazione di massa bruciata $x_{b,n}$ si calcola come:

$$x_{b,n} = \frac{\frac{V}{m} - \left[\left(1 - \sum_{i=1}^{n-1} x_{b,j}\right) v_u + \sum_{i=1}^{n-1} x_{b,j} v_{b,j}\right]}{v_{b,n} - v_u} = \\ = \frac{\frac{pV}{m} - \left[\left(1 - \sum_{i=1}^{n-1} x_{b,j}\right) R_u T_u + \sum_{i=1}^{n-1} x_{b,j} R_{b,j} T_{b,j}\right]}{R_{b,n} T_{b,n} - R_u T_u} \tag{2.16}$$

Il sistema non lineare composto dalle equazioni (2.7), (2.10), (2.14) e (2.16) viene risolto numericamente per incrementi differenziali delle seguenti variabili: la temperatura della zona unburned T_u, la temperatura di tutte le zone burned $T_{b,i}$ e la frazione di massa bruciata x_b.

Le proprietà termodinamiche dei reagenti e dei prodotti nelle equazioni sopra riportate, così come la concentrazione delle diverse specie, sono state valutate al termine di ogni intervallo di angolo di manovella $d\theta$. Le proprietà termodinamiche di ciascuna specie sono state determinate utilizzando le tabelle JANAF, eseguendo, per le zone di burned gas, un calcolo di composizione in equilibrio tra più specie, che include gli effetti della dissociazione. Inoltre, il modello è in grado di tenere conto della composizione variabile del combustibile e dell'umidità dell'aria di aspirazione.

2.2.2 Angolo di inizio combustione

Il sistema non lineare composto dalle equazioni (2.7), (2.10), (2.14) e (2.16) è fisicamente consistente solo una volta che la combustione è iniziata; perciò, è stata messa a punto una procedura per calcolare il punto di inizio combustione.

L'inizio della combustione coincide con il rilascio della prima frazione di energia e, di conseguenza, può essere rilevato nel momento in cui la pressione all'interno del cilindro inizia a differenziarsi dalla sua evoluzione temporale in assenza di combustione. Dal punto di vista termodinamico, l'istante di avvio della combustione può essere determinato risolvendo l'equazione di conservazione dell'energia relativa alla massa degli unburned gas presente nella camera durante la fase di compressione:

$$-qA\frac{d\theta}{\omega} - pdV = mdi \tag{2.17}$$

Il primo angolo di manovella in cui l'uguaglianza (2.17) non è più rispettata può essere assunto come punto di inizio combustione.

2.2.3 Procedura CAD, scambi termici e velocità di combustione

La procedura CAD fornisce, sotto l'ipotesi che la regione dei burned gas presenti un fronte sferico in espansione a partire dalla sede della candela, 4 dati di input, necessari per la valutazione degli scambi termici e della velocità di combustione:

- r_b è un vettore contenente il raggio della semi-sfera che racchiude la regione dei burned gas;
- $V_{chamber}$ è un vettore che rappresenta il volume della camera di combustione e può essere calcolato con una semplice relazione geometrica conoscendo il volume di spazio morto V_c;
- $A_b - A_{ub}$ è una matrice contenente la superficie totale della sfera dei burned gas considerando sia il bordo con le pareti che il quello con la regione unburned;
- V_b è una matrice contenente il volume della sfera precedentemente descritta.

Il flusso termico scambiato con le pareti viene calcolato tramite la seguente formulazione della legge della convezione di Newton, per tener conto delle

variazioni della differenza di temperatura gas-parete. Per ogni zona, il flusso termico è:

$$q = h\left[T - T_w + K\frac{D}{v_p}\frac{d(T - T_w)}{dt}\right] \tag{2.18}$$

dove D è l'alesaggio, $v_p = 2Ln$ è la velocità media del pistone e K è un parametro adimensionale di calibrazione.

Il coefficiente di scambio termico convettivo h nell'eq (2.18) viene stimato tramite la correlazione di Woschni:

$$h = C_0 D[m]^{-0.2} p[kPa]^{0.8} T[K]^{-0.55} w\left[\frac{m}{s}\right]^{0.8} \tag{2.19}$$

dove:

- $w = C_1 v_p + C_2 u'$
  - $C_1 = C_{1a} + C_{1b}(swirl\ ratio) = 2.31$
  - $u' = \frac{V_{\text{cyl}} T_0}{p_0 V_0}\left(p(\theta) - p_{\text{mot}}(\theta)\right)$, velocità caratteristica del processo di combustione
    - V_{cyl}, cilindrata
    - T_0, p_0, V_0, calcolati nel punto di chiusura della valvola di aspirazione
    - p_{mot}, pressione in cilindro in assenza di combustione
- C_0 e C_2, parametri di calibrazione

Il criterio adottato per la selezione dei parametri C_0 e C_2 consiste nel garantire che $x_{bmax} = x_b(EOC) = 0.99$, ovvero che la frazione di massa bruciata nel punto di fine combustione sia pari a 0.99.

La procedura CAD integrata con il modello multizona è stata ulteriormente sviluppata per calcolare la velocità di combustione turbolenta S_b e la velocità media di espansione u_b, tramite le seguenti formule:

$$S_b = \frac{dm_b}{dt}\frac{1}{\rho_u A_{b,f}} = \omega m \frac{\text{HRR}}{\rho_u A_{b,f}} \tag{2.20}$$

$$u_b = \frac{\partial V_b}{\partial t}\frac{1}{A_{b,f}} \tag{2.21}$$

L'area del fronte di fiamma $A_{b,f}$ nelle equazioni (2.20) e (2.21) è definita come la superficie sferica che rappresenta il bordo della regione che contiene al suo interno tutti i burned gas, Fig. 2.2 [5].

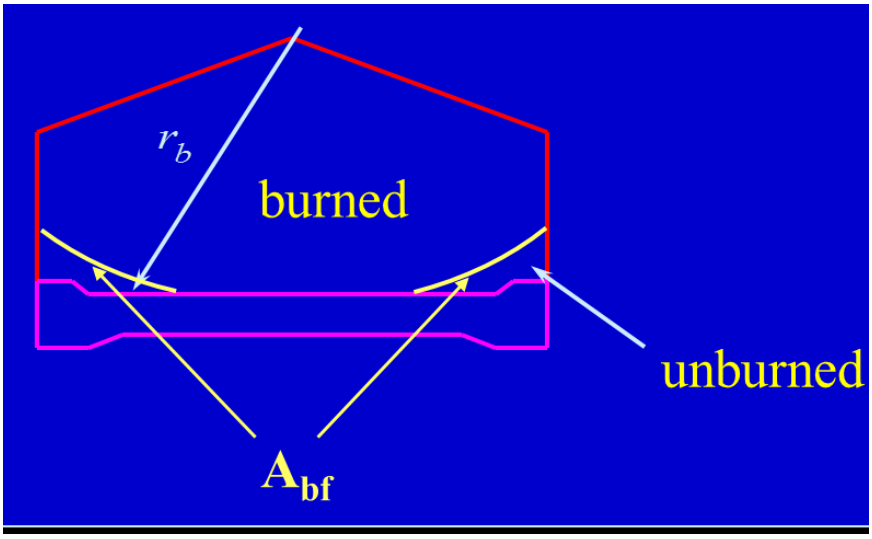


Figura 2.2: Superficie che contiene al suo interno tutti i burned gas

Inoltre, la velocità di espansione dei gas combusti u_g può essere calcolata come:

$$u_g = u_b - S_b \tag{2.22}$$

2.2.4 Modello di formazione degli NOx

Con il termine ossidi di azoto NOx si indica l'insieme delle emissioni di NO e di NO_2, che costituiscono pressoché la totalità degli ossidi di azoto emessi dal motore ad accensione comandata.

La principale sorgente di NOx è costituita dall'ossidazione dell'azoto atmosferico (azoto molecolare) durante il processo di combustione, a causa delle elevate temperature (>1800 K) raggiunte nella zona di reazione che spezzano il legame molecolare dell'azoto contenuto nell'aria.

I principali parametri che determinano la quantità degli NO prodotti da questi processi sono, in ordine di importanza:

- la storia temporale dei gas combusti in camera di combustione e, in particolare, il valore del picco della temperatura dei gas combusti raggiunto durante la combustione;
- a parità di temperatura di combustione, la concentrazione di ossigeno in camera.

Durante la successiva fase di espansione, quando i gas combusti si raffreddano, le reazioni chimiche che coinvolgono gli NOx si congelano, pertanto

i livelli degli NOx rilasciati allo scarico del motore sono molto maggiori rispetto a quelli che si avrebbero nelle condizioni di equilibrio chimico alla temperatura di scarico del motore.

Le reazioni che portano alla formazione di NOx nei motori possono essere raggruppate in quattro gruppi indipendenti, a seconda del meccanismo chimico che descrivono. Si parlerà perciò di:

- NOx termico: si forma ad alte temperature (dipendenza esponenziale) a causa della dissociazione dell'azoto atmosferico e della successiva reazione con l'ossigeno;
- NOx prompt: reazione a catena causata dai radicali idrocarburici CH che favoriscono la reazione tra l'azoto molecolare e l'ossigeno per formare specie intermedie che evolvono in NO;
- NOx nitroso: decomposizione di composti contenenti azoto presenti nel combustibile;
- NOx fuel: si forma principalmente nei motori diesel e nelle combustioni di combustibili contenenti azoto legato chimicamente.

Il meccanismo di formazione termico si basa sul sistema di equazioni studiato dal chimico russo Zeldovich negli anni '40 e poi ampliato da Lavoie, Heywood e Keck nel 1970, anche noto come meccanismo di Zeldovich superesteso. Le reazioni chimiche che compongono il sistema sono:

$$N_2 + O \rightarrow NO + N \tag{2.23}$$
$$N + O_2 \rightarrow NO + O \tag{2.24}$$
$$N + OH \rightarrow NO + H \tag{2.25}$$
$$H + N_2O \rightarrow N_2 + OH \tag{2.26}$$
$$O + N_2O \rightarrow N_2 + O_2 \tag{2.27}$$
$$O + N_2O \rightarrow NO + NO \tag{2.28}$$

Combinando le equazioni (2.23)-(2.28), si ottiene l'equazione di evoluzione della concentrazione istantanea di NO:

$$\frac{d[NO]_i}{dt} = 2\left[1 - \left(\frac{[NO]_i}{[NO]_{i,eq}}\right)^2\right] \times$$
$$\times \left(\frac{R_1}{1 + \frac{[NO]_i}{[NO]_{i,eq}} \frac{R_1}{R_2 + R_3}} + \frac{R_6}{1 + \frac{R_6}{R_4 + R_5}}\right) \tag{2.29}$$

Il pedice i indica la i-esima zona burned, mentre il pedice eq rappresenta la concentrazione di NOx all'equilibrio.

Le velocità di reazione $R_1 \div R_6$ sono determinate mediante una formulazione proposta da Miller nel 1998 [6], la quale si basa sull'espressione della costante di velocità di reazione k secondo la legge di Arrhenius:

$$R_i = aT^b e^{-\frac{A}{RT}} [reagenti]_i \tag{2.30}$$

con:

- a, b e A: costanti caratteristiche della reazione in esame, Fig. 2.3;
- R: costante universale dei gas perfetti;
- T: temperatura assoluta a cui si fa riferimento;
- $[reagenti]_i$: prodotto delle concentrazioni molari delle specie reagenti all'equilibrio chimico ad ogni temperatura e pressione, espresse in $\frac{mol}{cm^3}$.

Reazione	a	b	A/R
(1) -	1.800E+08	0.0	38370
(2) +	1.800E+04	1.0	4680
(3) +	7.100E+07	0.0	450
(4) +	7.587E+13	0.0	7600
(5) +	1.000E+14	0.0	14100
(6) +	6.900E+13	0.0	13400

Figura 2.3: Costanti di Miller per il calcolo delle velocità di reazione

Il meccanismo termico viene poi accoppiato con il meccanismo di formazione NOx prompt. Il meccanismo prompt venne studiato negli anni '70 del secolo scorso dal chimico americano Fenimore, il quale dimostrò che soprattutto in condizioni di miscela ricca non tutto l'ossido d'azoto originato

dalle fiamme di idrocarburi può essere spiegato dal meccanismo termico di Zeldovich.

Egli suggerì che una parte dell'azoto molecolare reagisca con l'ossigeno dell'aria per formare NO attraverso un altro meccanismo, iniziato dalla reazione di N_2 con radicali idrocarburici CH_i secondo la seguente reazione:

$$N_2 + CH \rightarrow HCN + N \tag{2.31}$$

L'idrocianide e l'azoto atomico formati reagiscono con l'ossigeno dell'aria attraverso una reazione in diverse fasi; la catena della reazione può essere così schematizzata:

$$HCN \xrightarrow{+O} NCO \xrightarrow{+H} NH \xrightarrow{+H} N \xrightarrow{+O_2+OH} NO \tag{2.32}$$

La formazione di NO è estremamente rapida, da cui il nome inglese di prompt NO. A differenza del NO termico, la dipendenza dalla temperatura è molto bassa e l'NO formato con questo meccanismo è inferiore al 5% del totale, se la miscela è stechiometrica o comunque non eccessivamente povera. Nel caso di miscele ricche o molto povere, invece, l'importanza relativa di questo meccanismo è notevole.

In letteratura si possono trovare poche indicazioni quantitative relative a questo meccanismo. In [7], ad esempio, Lavoie riprende alcuni dati sperimentali di Fenimore e propone un diagramma in cui è riportata la frazione di NO prompt con riferimento alla concentrazione di NO all'equilibrio, Fig. 2.4.

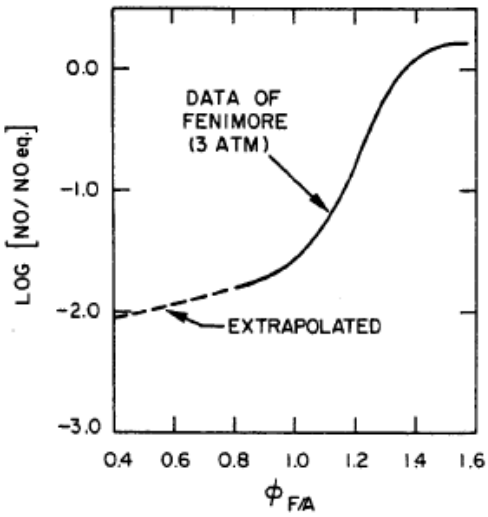


Figura 2.4: Rapporto tra gli NO prompt e la concentrazione all'equilibrio in funzione del rapporto di equivalenza ϕ

Accoppiando il meccanismo termico e prompt e aggiungendo il contributo agli NOx proveniente dai gas residui, il livello di NO per la zona i-esima dei burned gas considerata in un determinato istante di tempo t può essere espresso come:

$$[NO]_{i,t}N_{i,t} = [NO]_{i,t-dt}N_{i,t-dt} + \frac{d[NO]_i}{dt}N_{i,t}dt + \\ + \frac{m(x_{b_{i,t}} - x_{b_{i,t-dt}})\left([NO]_r \frac{M_{b,i}}{M_u} + [NO]_{\text{prompt}}\right)}{M_{b,i}} \tag{2.33}$$

dove N_i esprime il numero totale di moli nella zona i, $M_{b,i}$ e M_u sono le masse molari medie dei gas della regione burned e unburned rispettivamente.

2.3 Modelli di calcolo delle composizioni di burned ed unburned gas

Per risolvere le equazioni precedentemente enunciate, è necessario determinare la composizione delle *n+1* zone che costituiscono la carica e la concentrazione molare delle varie specie, in funzione della temperatura e della pressione. È importante sottolineare sin da ora che la composizione così ottenuta viene principalmente impiegata per il calcolo delle proprietà termochimiche dei gas, quali l'entalpia specifica i, il calore specifico a pressione costante c_p e la costante dei gas R.

Inoltre, nell'ambito della routine di calcolo della concentrazione istantanea di NO in camera, la composizione dei burned gas viene utilizzata per la valutazione della concentrazione molare delle specie che intervengono nelle reazioni di formazione degli ossidi d'azoto secondo il meccanismo 'termico' proposto da Zeldovich e quello 'prompt' proposto da Fenimore.

2.3.1 Modello per la combustione di un generico combustibile a base idrocarburica

Si vuole considerare un'equazione di combustione in forma estesa che tenga conto di una composizione del combustibile e dell'aria più complessa, i cui reagenti si esprimano come segue:

$$C_xH_yO_z + E \cdot H_2 + F \cdot O_2 + G \cdot N_2 + L \cdot CO_2 + P \cdot H_2O + Q \cdot CO + \\ + n \cdot (O_2 + A \cdot N_2 + B \cdot CO_2 + C \cdot H_{\text{abs}} \cdot H_2O) \tag{2.34}$$

dove:

- *E, F, G, L, P e Q* tengono conto di ulteriori specie che possono essere presenti nel combustibile;
- A, B e C tengono conto di una composizione più accurata dell'aria;
- H_{abs} rappresenta l'umidità assoluta in $\frac{g}{kg}$ di aria secca.

Indicando con n_{stech} il numero di moli di ossigeno in proporzione stechiometrica e ricordando che il rapporto di equivalenza è definito come $\phi = F/A$, allora il numero di molecole n che partecipa alla reazione si può esprimere:

$$n = \frac{n_{stech}}{\phi} \tag{2.35}$$

n_{stech} si ricava bilanciando la reazione di combustione:

$$C_xH_yO_z + E \cdot H_2 + (n_{stech} + F) \cdot O_2 + (G + n_{stech}A) \cdot N_2 + (L + n_{stech}B) \cdot CO_2 + \\ + (P + n_{stech}CH_{abs}) \cdot H_2O + Q \cdot CO \rightarrow a \cdot CO_2 + b \cdot H_2O + c \cdot N_2$$

Si ottiene così il seguente sistema lineare nelle incognite a, b, c e n_{stech}:

$$\begin{aligned}
&\textit{carbonio} \quad C) \quad a = x + (L + n_{stech}B) + Q \\
&\textit{idrogeno} \quad H_2) \quad b = \frac{y}{2} + E + (P + n_{stech}CH_{abs}) \\
&\textit{ossigeno} \quad O_2) \quad a + \frac{b}{2} = \frac{z}{2} + (n_{stech} + F) + (L + n_{stech}B) + \frac{(P + n_{stech}CH_{abs})}{2} + \frac{Q}{2} \\
&\textit{azoto} \quad N_2) \quad c = (G + n_{stech}A)
\end{aligned}$$

Sostituendo a e b nella terza equazione e semplificando, si ricava n_{stech}:

$$n_{stech} = x + \frac{y}{4} - \frac{z}{2} + \frac{E}{2} - F + \frac{Q}{2}$$

Il termine $C_xH_yO_z$ viene utilizzato per compattare le principali specie idrocarburiche in un unico elemento; per esempio, nel caso di gas naturale CNG, che è composto da metano, etano, propano, butano, pentano, esano (rispettivamente di formula bruta CH_4, C_2H_6, C_3H_8, C_4H_{10}, C_5H_{12}, C_6H_{14}), i pedici x, y e z si calcolano con le seguenti espressioni:

$$\begin{aligned}
x &= \frac{[CH_4] + 2 \cdot [C_2H_6] + 3 \cdot [C_3H_8] + 4 \cdot [C_4H_{10}] + 5 \cdot [C_5H_{12}] + 6 \cdot [C_6H_{14}]}{[CH_4] + [C_2H_6] + [C_3H_8] + [C_4H_{10}] + [C_5H_{12}] + [C_6H_{14}]} \\
y &= \frac{4 \cdot [CH_4] + 6 \cdot [C_2H_6] + 8 \cdot [C_3H_8] + 10 \cdot [C_4H_{10}] + 12 \cdot [C_5H_{12}] + 14 \cdot [C_6H_{14}]}{[CH_4] + [C_2H_6] + [C_3H_8] + [C_4H_{10}] + [C_5H_{12}] + [C_6H_{14}]} \\
z &= 0
\end{aligned} \tag{2.36}$$

dove *[x]* indica la concentrazione in volume (o frazione molare, numericamente equivalenti per specie allo stato gassoso) della specie x nel combustibile.

I coefficienti *E, F, G, L, P e Q* invece rappresentano la concentrazione in volume delle ulteriori specie che possono essere presenti nel combustibile, normalizzate sulla concentrazione degli idrocarburi:

$$\begin{aligned}
E &= \frac{[H_2]}{[CH_4]+[C_2H_6]+[C_3H_8]+[C_4H_{10}]+[C_5H_{12}]+[C_6H_{14}]} \\
F &= \frac{[O_2]}{[CH_4]+[C_2H_6]+[C_3H_8]+[C_4H_{10}]+[C_5H_{12}]+[C_6H_{14}]} \\
G &= \frac{[N_2]}{[CH_4]+[C_2H_6]+[C_3H_8]+[C_4H_{10}]+[C_5H_{12}]+[C_6H_{14}]} \\
L &= \frac{[CO_2]}{[CH_4]+[C_2H_6]+[C_3H_8]+[C_4H_{10}]+[C_5H_{12}]+[C_6H_{14}]} \\
P &= \frac{[H_2O]}{[CH_4]+[C_2H_6]+[C_3H_8]+[C_4H_{10}]+[C_5H_{12}]+[C_6H_{14}]} \\
Q &= \frac{[CO]}{[CH_4]+[C_2H_6]+[C_3H_8]+[C_4H_{10}]+[C_5H_{12}]+[C_6H_{14}]}
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Invece, i coefficienti A, B e C rappresentano la frazione molare delle specie presente nell'aria, normalizzate sulla frazione molare dell'ossigeno.

$$\begin{aligned}
A &= \frac{[N_2]}{[O_2]_{aria}} \\
B &= \frac{[CO_2]}{[O_2]_{aria}} \\
C &= \frac{1.6077 \cdot 10^{-3}}{[O_2]_{aria}}
\end{aligned} \tag{2.38}$$

Per il calcolo del numero di moli dei prodotti di combustione, è stato scelto di ricondursi ad una forma dei reagenti della reazione di combustione molto utilizzata in letteratura, ovvero:

$$\begin{aligned}
&\phi^*\varepsilon^*C + 2(1-\varepsilon^*)\phi^*H_2 + O_2 + \psi^*N_2 \rightarrow \\
&n_{CO_2}CO_2 + n_{H_2O}H_2O + n_{N_2}N_2 + n_{O_2}O_2 + n_{CO}CO + n_{H_2}H_2
\end{aligned} \tag{2.39}$$

con:

- n_i indica il numero di moli di ogni specie chimica i che si formano per ogni mole di ossigeno molecolare O_2;
- ϕ^*, ε^* e ψ^* sono delle frazioni molari corrette che che tengono conto di tutte le molecole di reagenti.

Perciò, per ricavare le espressioni di ϕ^*, ε^* e ψ^*, occorre riordinare i termini dell'equazione in modo analogo:

$$\begin{aligned}&(x+L+Q+nB)C+\left(\frac{y}{2}+E+P+nCH_{\text{abs}}\right)H_2+\\&+\left(\frac{z}{2}+F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+n+nB+\frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right)O_2+(G+nA)N_2\end{aligned} \tag{2.40}$$

Infine, si riferisce tutto ad una molecola di O_2 reagente:

$$\begin{aligned}&\frac{(x+L+Q+nB)}{\left(\frac{z}{2}+F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+n+nB+\frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right)}C+\\&+\frac{\left(\frac{y}{2}+E+P+nCH_{\text{abs}}\right)}{\left(\frac{z}{2}+F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+n+nB+\frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right)}H_2+\\&+O_2+\frac{(G+nA)}{\left(\frac{z}{2}+F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+n+nB+\frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right)}N_2\end{aligned} \tag{2.41}$$

Sostituendo il numero di molecole n tramite l'eq 2.35, è possibile ricavare le espressioni dei parametri ϕ^*, ε^* e ψ^*:

$$\varepsilon^*=\frac{2\cdot\left(x+L+Q+\frac{n_{stech}}{\phi}B\right)}{\frac{y}{2}+E+P+\frac{n_{stech}}{\phi}CH_{abs}+2\cdot\left(x+L+Q+\frac{n_{stech}}{\phi}B\right)} \tag{2.42}$$

$$\phi^*=\frac{1}{2}\cdot\frac{\frac{y}{2}+E+P+\frac{n_{stech}}{\phi}CH_{abs}+2\cdot\left(x+L+Q+\frac{n_{stech}}{\phi}B\right)}{\frac{z}{2}+F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+\frac{n_{stech}}{\phi}\cdot\left(1+B+\frac{CH_{abs}}{2}\right)} \tag{2.43}$$

$$\psi^*=\frac{G+A\cdot\frac{n_{stech}}{\phi}}{\frac{z}{2}+F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+\frac{n_{stech}}{\phi}\cdot\left(1+B+\frac{CH_{abs}}{2}\right)} \tag{2.44}$$

Il calcolo dei numeri di moli dei prodotti con i reagenti espressi secondo l'equazione 2.39 corrisponde al calcolo dei prodotti della reazione di un numero di moli di idrocarburo $C_xH_yO_z$ pari a:

$$\frac{\varepsilon^*\phi^*}{x}=\frac{1}{x}\cdot\frac{\left(x+L+Q+\frac{n_{\text{stech}}}{\phi}B\right)}{\frac{z}{2}+F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+\frac{n_{\text{stech}}}{\phi}\left(1+B+\frac{CH_{\text{abs}}}{2}\right)}=\frac{1}{n^*} \tag{2.45}$$

avendo inteso con n^* il numero di molecole di O_2 che partecipano alla reazione scritta nel modo più generale con una molecola di $C_xH_yO_z$.

In altre parole, i reagenti di cui si sono calcolati i prodotti con la formula 2.39 sono:

$$\frac{1}{n^*} \cdot \Bigg[C_xH_yO_z + E \cdot H_2 + F \cdot O_2 + G \cdot N_2 + L \cdot CO_2 + P \cdot H_2O + Q \cdot CO + \\ + \frac{n_{\text{stech}}}{\phi} \cdot (O_2 + A \cdot N_2 + B \cdot CO_2 + C \cdot H_{\text{abs}} \cdot H_2O) \Bigg] \tag{2.46}$$

Poiché gli unburned gas sono formati in parte da carica fresca ed in parte dai gas residui della combustione del ciclo precedente e del sistema EGR, definiamo la frazione di gas di scarico totali nella miscela fresca:

$$x_{\text{res}} = \frac{m_{EGR} + m_r}{m^*} = \left(\frac{EGR}{100}\right)(1 - x_r) + x_r \tag{2.47}$$

con:

- m_{EGR}: massa di gas di scarico ricircolati tramite valvola EGR;
- m_r: massa di gas residui;
- m^*: massa totale, somma della massa della carica fresca e della massa dei gas residui;
- $x_r = \dfrac{m_r}{m^*}$: frazione di massa residua.

Perciò, per il calcolo delle proprietà degli unburned gas, la miscela da considerare è la seguente:

$$(1 - x_{\text{res}}) \Bigg\{ \frac{1}{n^*} \Big[C_xH_yO_z + E \cdot H_2 + F \cdot O_2 + G \cdot N_2 + L \cdot CO_2 + P \cdot H_2O + Q \cdot CO + \\ + \frac{n_{\text{stech}}}{\phi} \cdot (O_2 + A \cdot N_2 + B \cdot CO_2 + C \cdot H_{\text{abs}} \cdot H_2O) \Big] \Bigg\} + \\ + x_{\text{res}} \Big(n_{CO_2}CO_2 + n_{H_2O}H_2O + n_{N_2}N_2 + n_{O_2}O_2 + n_{CO}CO + \\ + n_{H_2}H_2 + n_H H + n_O O + n_{OH}OH + n_{NO}NO \Big) \tag{2.48}$$

Prima di passare al calcolo dei numeri di moli n_i, è utile elencare tutte le ipotesi adottate:

- nel funzionamento con miscele povere e stechiometriche ($\phi^* \leq 1$), CO e H_2 possono essere trascurati;
- nel funzionamento con miscele ricche e stechiometriche ($\phi^* > 1$), O_2 può essere trascurato.

Dall'equazione 2.39, tramite un semplice bilancio della reazione chimica, è possibile ricavare i numeri di moli n_i di ciascun prodotto della reazione:

Specie	n_i	
	$\phi^* \leq 1$	$\phi^* > 1$
CO_2	$\varepsilon^*\phi^*$	$\varepsilon^*\phi^* - c$
H_2O	$2(1-\varepsilon^*)\phi^*$	$2(1-\varepsilon^*\phi^*) + c$
CO	0	c
H_2	0	$2(\phi^* - 1) - c$
O_2	$1 - \phi^*$	0
N_2	ψ^*	ψ^*
Somma: n_b	$(1-\varepsilon^*)\phi^* + 1 + \psi^*$	$(2-\varepsilon^*)\phi^* + \psi^*$

Tabella 2.1: Composizione dei burned gas in assenza di dissociazione, per reazione di combustione in forma estesa

Nel caso di miscela ricca, le espressioni dei numeri di moli incogniti si possono ricavare in funzione del parametro c, numero di moli di CO prodotti dalla combustione per mole di O_2 reagente, poiché altrimenti avremmo cinque incognite da determinare a fronte di quattro equazioni di bilancio.

Infine, è possibile ricavare dall'equazione 2.48 la composizione degli unburned gas, specie per specie, in funzione del rapporto di equivalenza:

Specie	n_i	
	$\phi^* \leq 1$	$\phi^* > 1$
C_xH_y	$(1-x_{res})n^*$	$(1-x_{res})n^*$
CO_2	$x_{res} \cdot \varepsilon^*\phi^* + (1-x_{res})(Bn+L)/n^*$	$x_{res} \cdot (\varepsilon^*\phi^* - c) + (1-x_{res})(Bn+L)/n^*$
H_2O	$2x_{res}(1-\varepsilon^*)\phi^* + (1-x_{res})(CH_{abs}n+P)/n^*$	$x_{res} \cdot [2 \cdot (1-\varepsilon^*\phi^*) + c] + (1-x_{res})(CH_{abs}n+P)/n^*$
CO	$(1-x_{res})Q/n^*$	$x_{res} \cdot c + (1-x_{res})Q/n^*$
H_2	$(1-x_{res})E/n^*$	$x_{res} \cdot [2(\phi^*-1) - c] + (1-x_{res})E/n^*$
O_2	$(1-\phi^*)x_{res} + (1-x_{res})(n+F)/n^*$	$(1-x_{res})(n+F)/n^*$
N_2	$\psi^* \cdot x_{res} + (1-x_{res})(An+G)/n^*$	$\psi^* \cdot x_{res} + (1-x_{res})(An+G)/n^*$
Somma	n_u	n_u

Tabella 2.2: Composizione degli unburned gas, per reazione di combustione in forma estesa

2.3.2 Modello per la combustione di un combustibile 100% H_2

In questa sezione, si farà riferimento a una combustione al 100% H_2 ogni volta che non è presente alcuna frazione molare di idrocarburi.

L'implementazione di un modello specifico per la combustione di un combustibile interamente composto da idrogeno si rende necessaria in quanto il software, nella sua configurazione originaria, era stato concepito esclusivamente per operare con combustibili convenzionali, quali benzina, metano, CNG e miscele di gas combustibili, come ad esempio miscele metano-idrogeno. All'epoca, l'idrogeno puro non era ancora considerato un'opzione concreta come vettore energetico per la propulsione di veicoli terrestri; inoltre, la transizione dai combustibili fossili a soluzioni più sostenibili non era minimamente prevista.

Di conseguenza, la formulazione adottata per il calcolo della composizione e delle concentrazioni molari era strettamente basata sul concetto di idrocarburo. Infatti, è sufficiente analizzare le equazioni impiegate per il calcolo di parametri quali i coefficienti *E, F, G, L, P e Q* (2.37) o i parametri ϕ^*, ε^* e ψ^* (2.42, 2.43, 2.44)per comprendere come il modello non sia applicabile in assenza di idrocarburi.

Il nuovo modello implementato adatta opportunamente le equazioni del modello generale precedente per eliminare la dipendenza dagli idrocarburi, preservando sostanzialmente la stessa struttura al fine di evitare problemi legati alla nomenclatura delle variabili.

L'equazione di combustione in forma estesa 2.34 è stata modificata eliminando il termine idrocarburico $C_xH_yO_z$:

$$\begin{aligned} &E \cdot H_2 + F \cdot O_2 + G \cdot N_2 + L \cdot CO_2 + P \cdot H_2O + Q \cdot CO + \\ &+ n \cdot (O_2 + A \cdot N_2 + B \cdot CO_2 + C \cdot H_{\text{abs}} \cdot H_2O) \end{aligned} \tag{2.49}$$

I coefficienti *E, F, G, L, P e Q*, invece, ora rappresentano direttamente la concentrazione volumetrica delle ulteriori specie presenti nel combustibile, eliminando qualsiasi dipendenza dalle concentrazioni di idrocarburi.

D'altra parte, i coefficienti A, B e C, che esprimono la frazione molare delle specie presente nell'aria, normalizzate sulla frazione molare dell'ossigeno,

rimangono ovviamente invariati:

$$A = \frac{[N_2]}{[O_2]_{aria}}$$
$$B = \frac{[CO_2]}{[O_2]_{aria}}$$
$$C = \frac{1.6077 \cdot 10^{-3}}{[O_2]_{aria}}$$

Il numero di moli di ossigeno in proporzione stechiometrica, n_{stech}, utilizzato nell'equazione 2.35, viene determinato esattamente con lo stesso metodo precedente, con la differenza che i termini x, y e z, associati alla componente idrocarburica, vengono opportunamente eliminati:

- Equazione chimica di combustione in assenza di idrocarburi:

$$E \cdot H_2 + (n_{stech} + F) \cdot O_2 + (G + n_{stech}A) \cdot N_2 + (L + n_{stech}B) \cdot CO_2 + \\ + (P + n_{stech}CH_{abs}) \cdot H_2O + Q \cdot CO \rightarrow a \cdot CO_2 + b \cdot H_2O + c \cdot N_2$$

- Sistema lineare nelle incognite a, b, c e n_{stech}:

$$\begin{aligned} &carbonio \quad C) \quad a = (L + n_{stech}B) + Q \\ &idrogeno \quad H_2) \quad b = E + (P + n_{stech}CH_{abs}) \\ &ossigeno \quad O_2) \quad a + \frac{b}{2} = (n_{stech} + F) + (L + n_{stech}B) + \frac{(P + n_{stech}CH_{abs})}{2} + \frac{Q}{2} \\ &azoto \quad N_2) \quad c = (G + n_{stech}A) \end{aligned}$$

- Sostituendo a e b nella terza equazione e semplificando, si ricava n_{stech}:

$$n_{stech} = \frac{E}{2} - F + \frac{Q}{2}$$

Per il calcolo del numero di moli dei prodotti di combustione, viene utilizzata la stessa formulazione presente in letteratura precedentemente utilizzata (2.39), ovvero:

$$\phi^* \varepsilon^* C + 2(1 - \varepsilon^*)\phi^* H_2 + O_2 + \psi^* N_2 \rightarrow \\ n_{CO_2}CO_2 + n_{H_2O}H_2O + n_{N_2}N_2 + n_{O_2}O_2 + n_{CO}CO + n_{H_2}H_2$$

L'equazione di combustione riordinata (2.40) diventa:

$$(L + Q + nB)C + (E + P + nCH_{\text{abs}})\, H_2 + \\ + \left(F + L + \frac{P}{2} + \frac{Q}{2} + n + nB + \frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right) O_2 + (G + nA)N_2 \tag{2.50}$$

Normalizzando nuovamente rispetto alle moli di O_2 (2.41):

$$\begin{aligned}
&\frac{(L+Q+nB)}{\left(F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+n+nB+\frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right)}C+\\
&+\frac{(E+P+nCH_{\text{abs}})}{\left(F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+n+nB+\frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right)}H_2+\\
&+O_2+\frac{(G+nA)}{\left(F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+n+nB+\frac{nCH_{\text{abs}}}{2}\right)}N_2
\end{aligned} \tag{2.51}$$

A questo punto, è possibile esplicitare nuovamente i parametri ϕ^*, ε^* e ψ^*:

$$\varepsilon^* = \frac{2\cdot\left(L+Q+\frac{n_{stech}}{\phi}B\right)}{E+P+\frac{n_{stech}}{\phi}CH_{abs}+2\cdot\left(L+Q+\frac{n_{stech}}{\phi}B\right)} \tag{2.52}$$

$$\phi^* = \frac{1}{2}\cdot\frac{E+P+\frac{n_{stech}}{\phi}CH_{abs}+2\cdot\left(L+Q+\frac{n_{stech}}{\phi}B\right)}{F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+\frac{n_{stech}}{\phi}\cdot\left(1+B+\frac{CH_{abs}}{2}\right)} \tag{2.53}$$

$$\psi^* = \frac{G+A\cdot\frac{n_{stech}}{\phi}}{F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+\frac{n_{stech}}{\phi}\cdot\left(1+B+\frac{CH_{abs}}{2}\right)} \tag{2.54}$$

Il numero di moli n^* dei prodotti con i reagenti espressi secondo l'equazione 2.39, ovvero il numero di moli di O_2 che partecipano alla reazione, diventa:

$$n^* = F+L+\frac{P}{2}+\frac{Q}{2}+\frac{n_{stech}}{\phi}\cdot\left(1+B+\frac{CH_{abs}}{2}\right) \tag{2.55}$$

Infine, la composizione degli unburned gas (quella dei burned gas rimane uguale, Tab.2.1), specie per specie, in funzione del rapporto di equivalenza, diventa:

Specie	n_i	
	$\phi^* \leq 1$	$\phi^* > 1$
C_xH_y	0	0
CO_2	$x_{res} \cdot \varepsilon^* \phi^* + (1 - x_{res})(Bn + L)/n^*$	$x_{res} \cdot (\varepsilon^* \phi^* - c) + (1 - x_{res})(Bn + L)/n^*$
H_2O	$2x_{res}(1 - \varepsilon^*)\phi^* + (1 - x_{res})(CH_{abs}n + P)/n^*$	$x_{res} \cdot [2 \cdot (1 - \varepsilon^* \phi^*) + c] + (1 - x_{res})(CH_{abs}n + P)/n^*$
CO	$(1 - x_{res})Q/n^*$	$x_{res} \cdot c + (1 - x_{res})Q/n^*$
H_2	$(1 - x_{res})E/n^*$	$x_{res} \cdot [2(\phi^* - 1) - c] + (1 - x_{res})E/n^*$
O_2	$(1 - \phi^*)x_{res} + (1 - x_{res})(n + F)/n^*$	$(1 - x_{res})(n + F)/n^*$
N_2	$\psi^* \cdot x_{res} + (1 - x_{res})(An + G)/n^*$	$\psi^* \cdot x_{res} + (1 - x_{res})(An + G)/n^*$
Somma	n_u	n_u

Tabella 2.3: Composizione degli unburned gas, per reazione di combustione in forma estesa, in assenza di idrocarburi

Capitolo 3

Validazione e Risultati

Al fine di validare le modifiche apportate al software diagnostico, sono state condotte simulazioni in diverse condizioni operative, basate sui punti motore riportati nella Tabella 1.1. Per tali punti, le condizioni di funzionamento erano note e sono state effettuate le misurazioni necessarie per acquisire i dati di input.

In particolare, per ciascun punto operativo del motore, sono state eseguite simulazioni considerando due differenti composizioni di combustibile:

- Composizione 1) 100% H_2
- Composizione 2) 99.75% H_2 + 0.25% CO_2

La Composizione 1) rappresenta l'elemento centrale di questa analisi, in quanto consente di verificare la capacità del software di gestire una simulazione in assenza di idrocarburi nel combustibile; la Composizione 2), invece, è stata impiegata principalmente per valutare il comportamento del software in presenza di altre possibili specie chimiche nel combustibile.

Per quanto riguarda la composizione dell'aria, è stata adottata una modellazione standard dell'aria atmosferica, con l'aggiunta della possibilità di considerare l'umidità. Quest'ultima risulta particolarmente rilevante per migliorare l'accuratezza del calcolo delle temperature in camera di combustione e, di conseguenza, delle emissioni di NO_X. La composizione dell'aria considerata è la seguente: $20.95\% O_2 + 79.02\% N_2 + 0.03\% CO_2$.

Perciò, i coefficienti moltiplicativi per ogni specie, secondo l'equazione 2.49, per le due composizioni prese in esame, valgono:

	E	**F**	**G**	**L**	**P**	**Q**	**A**	**B**	**CH_{abs}**
Comp 1)	1.0000	0	0	0	0	0	3.7718	0.0014	0.0744
Comp 2)	0.9975	0	0	0.0025	0	0	3.7718	0.0014	0.0744

Tabella 3.1: Coefficienti moltiplicativi equazione di combustione in forma estesa 2.49

	$\boldsymbol{H_i}$ **[MJ/kg]**	$\boldsymbol{Wobbe}$ **[MJ/Nm^3]**	$\boldsymbol{\epsilon^*}$	$\boldsymbol{\phi^*}$	$\boldsymbol{\psi^*}$
Comp 1)	120	38.75	0.003	0.458	3.632
Comp 2)	114	37.69	0.008	0459	3.624

Tabella 3.2: Proprietà chimiche del combustibile e parametri ϵ^*, ϕ^* e ψ^*

Di seguito sono riportati i principali parametri di output, caratteristici di un software di diagnostica pressure-based per motori a combustione interna, relativi a entrambe le composizioni di combustibile analizzate. L'ultima sezione, invece, è dedicata ad un'analisi comparativa tra i risultati ottenuti.

3.1 100% H_2

Il primo parametro calcolato è la frazione di massa bruciata x_b, ovvero la frazione di combustibile che è stata bruciata fino a un determinato istante della combustione.

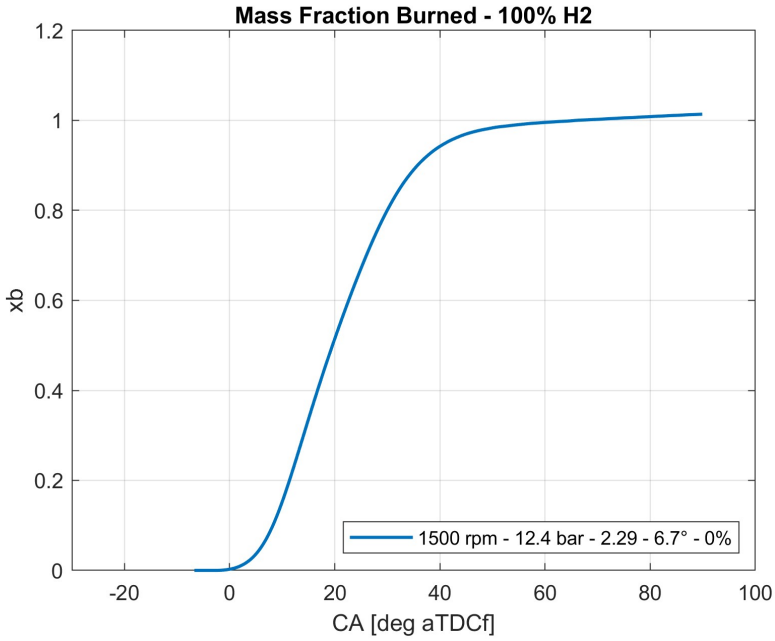
Gli scambi termici (equazione 2.19) sono stati calibrati per garantire che $x_{bmax} = x_b(EOC) = 0.99$, ovvero che la frazione di massa bruciata nel punto di fine combustione sia pari a 0.99.

N°	**Engine speed [RPM]**	**IMEP [bar]**	**Lambda [-]**	**SA [CA deg bTDCf]**	**EGR [%]**	**C_0**	**C_2 (10^{-3})**
1)	1500	12.40	2.29	6.0	0	286	5.2
2)	1500	12.75	2.29	10.0	0	257	4.8
3)	1500	13.10	2.28	13.6	0	232	4.5
4)	1500	13.19	2.29	17.2	0	213	4.3
5)	2000	20.40	2.28	18.7	0	283	5.2
6)	3000	15.90	2.20	14.5	0	391	6.5
7)	3000	17.15	2.20	24.0	0	305	5.4
8)	3000	12.50	2.30	21.4	15	489	7.8
9)	3000	20.50	1.83	12.8	15	410	6.8

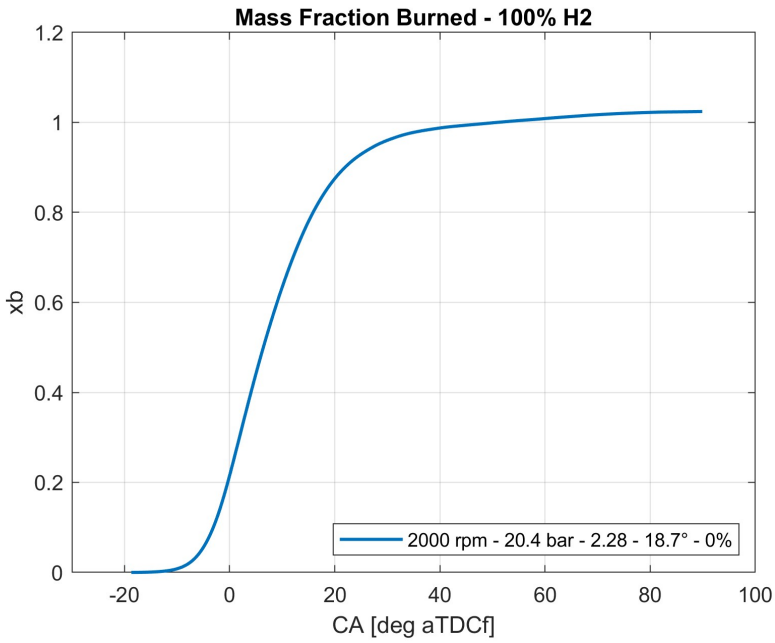
Tabella 3.3: Parametri di calibrazione C_0 e C_2, combustione 100% H_2

Ogni immagine è accompagnata da una didascalia che indica il punto operativo del motore utilizzato per la simulazione, secondo la seguente formattazione: *Engine speed* [rpm] - $IMEP$ [bar] - *Lambda* [-] - *Spark advance* [deg bTDCf] - EGR [%].

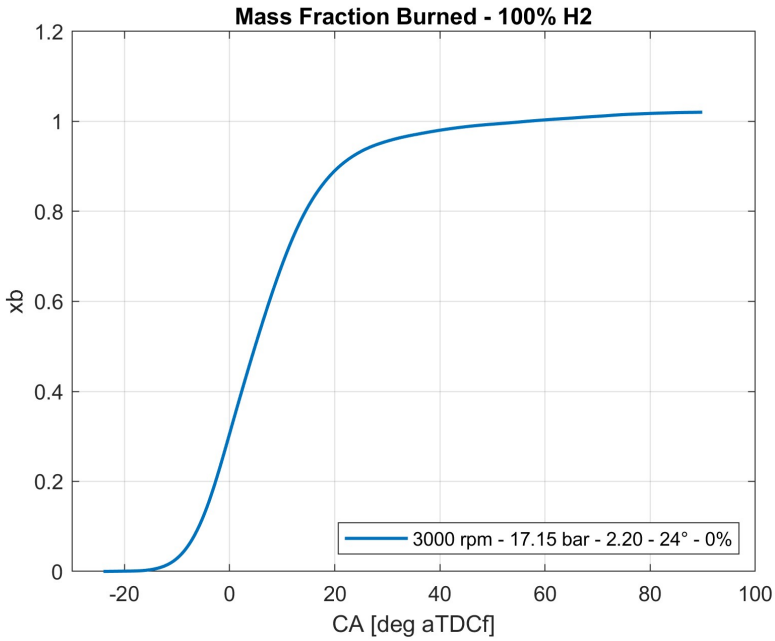
Vengono riportati, a titolo di esempio, i grafici dei punti operativi 1), 5), 7) e 9) della Tabella 1.1.



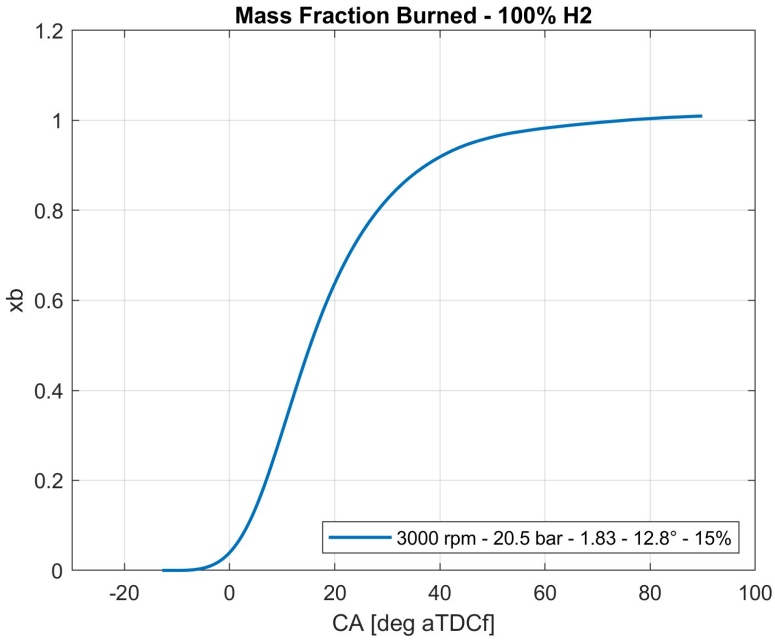
(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 2000 rpm - 20.4 bar - 2.28 - 18.7° - 0%



(c) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%



(d) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

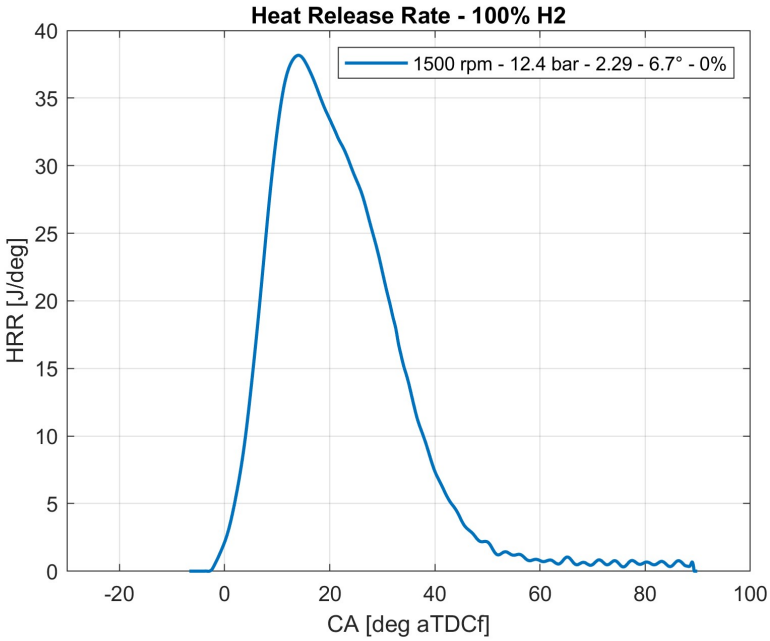
Figura 3.1: Mass Fraction Burned x_b, combustione 100% H_2

Il secondo parametro è HRR (Heat Release Rate), ovvero la velocità con

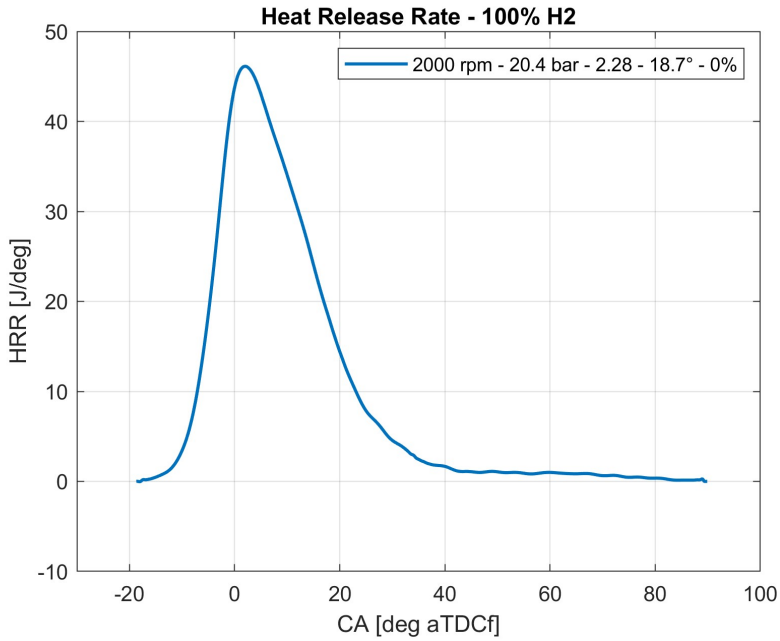
cui l'energia chimica del combustibile viene rilasciata sotto forma di calore durante la combustione.

In termini matematici, esiste una relazione differenziale tra HRR e x_b: la frazione di massa bruciata è l'integrale cumulativo del Heat Release Rate normalizzato rispetto al calore totale disponibile:

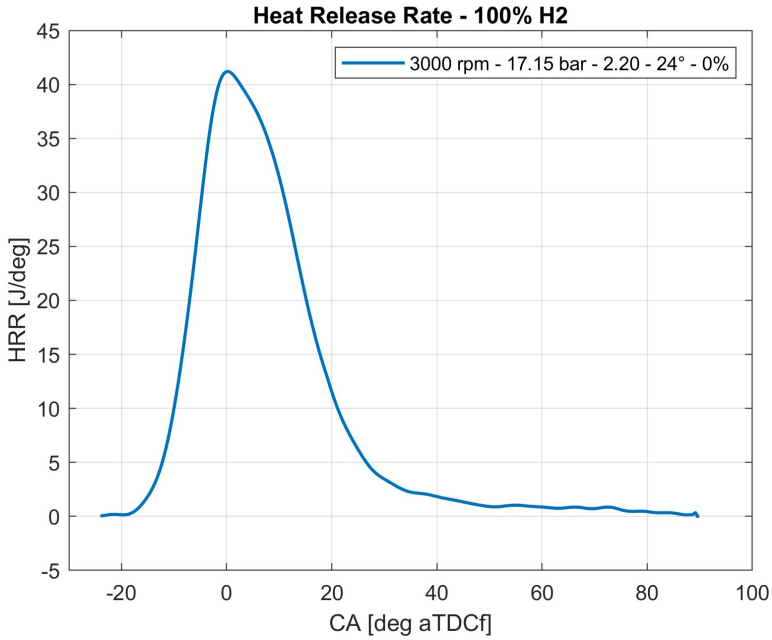
$$x_b = \int \frac{HRR \cdot d\theta}{Q_{tot}} \tag{3.1}$$



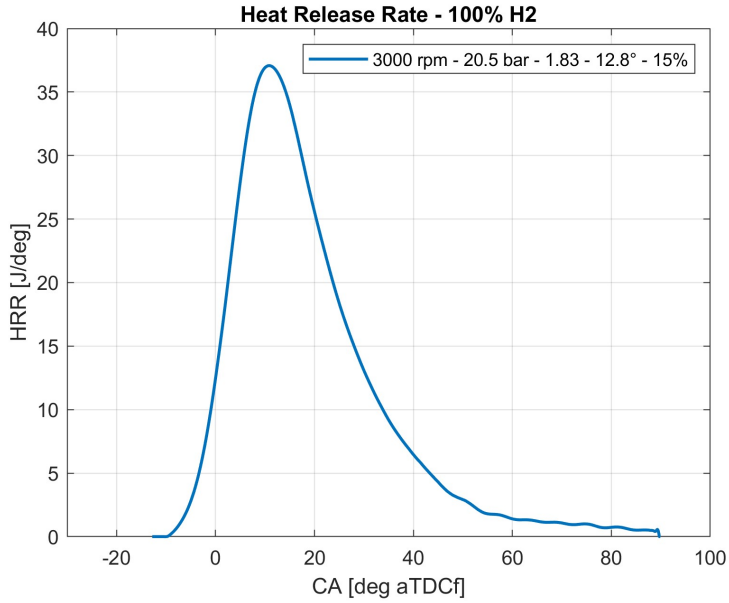
(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 2000 rpm - 20.4 bar - 2.28 - 18.7° - 0%



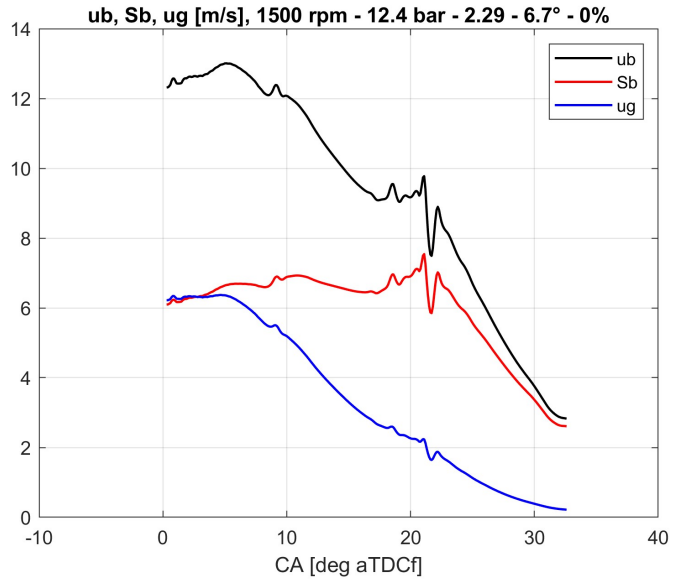
(c) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%



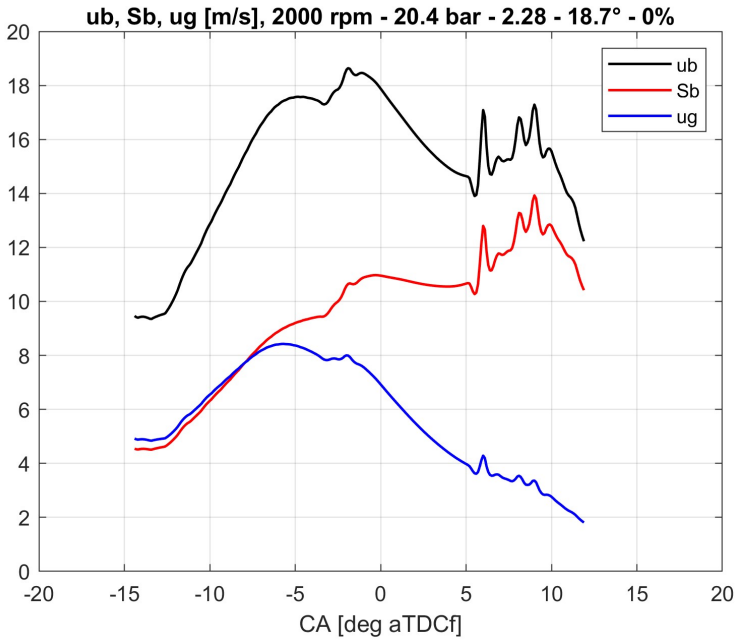
(d) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

Figura 3.2: Heat Release Rate HRR, combustione 100% H_2

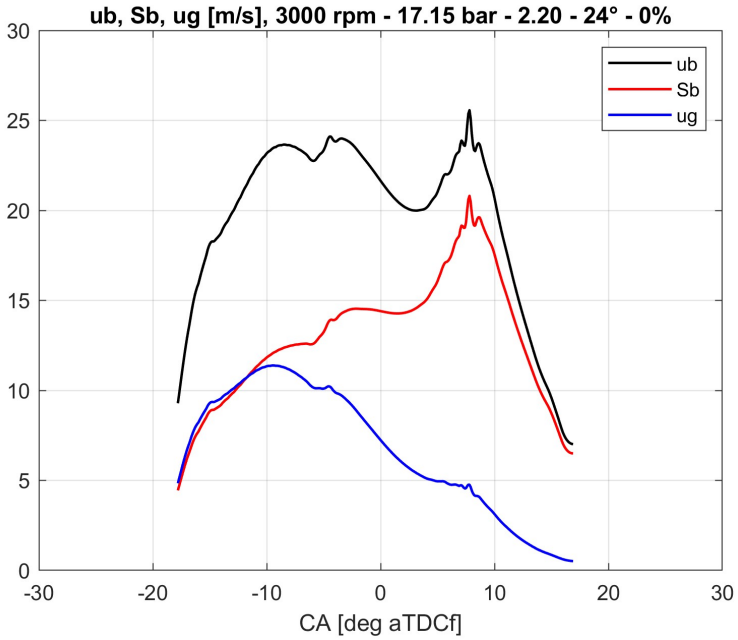
Analizziamo ora gli andamenti delle velocità di combustione, ricordando che S_b è la velocità di combustione turbolenta, u_b è la velocità media di espansione e u_g è la velocità di espansione dei gas combusti.



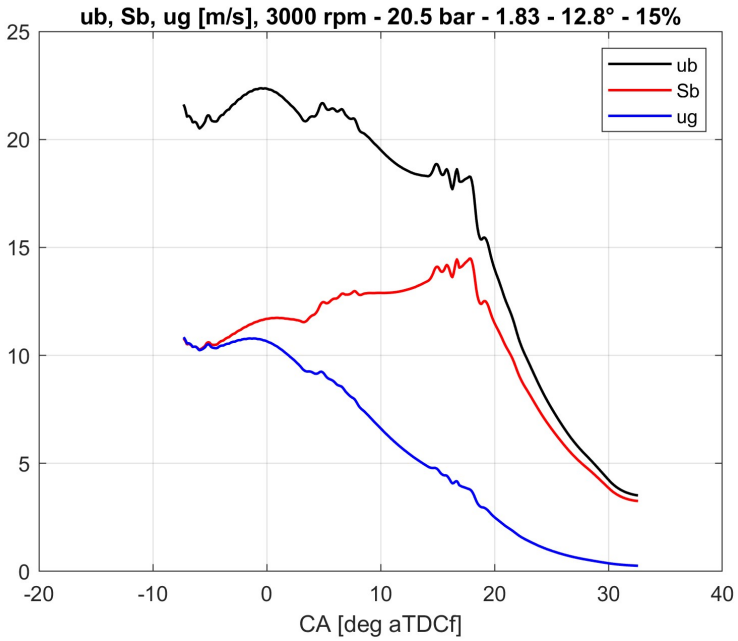
(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 2000 rpm - 20.4 bar - 2.28 - 18.7° - 0%



(c) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%



(d) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

Figura 3.3: u_b, S_b, u_g, combustione 100% H_2

Come mostrato in figura 3.3, il modello non calcola i valori di velocità immediatamente dopo l'accensione della scintilla. Questo perché l'ipotesi secondo cui il fronte di fiamma assume una forma sferica (con un fronte di fiamma increspato dalla turbolenza) non è valida sin dall'inizio della combustione, ma diventa applicabile solo a partire da circa $xb = 1\%$.

Le curve ottenute presentano alcune criticità, evidenziate nei seguenti punti:

- L'andamento delle velocità risulta plausibile solo nella fase iniziale della combustione
- A partire da un determinato angolo di manovella (Crank Angle, CA), generalmente compreso tra 20° e 30° dallo Start of Combustion (SOC), emergono discontinuità. Queste sono probabilmente dovute al contatto del fronte di fiamma con il pistone o le pareti del cilindro, evento che determina un cambiamento improvviso della geometria e una variazione del raggio e dell'area della sfera di gas combusto. Tale fenomeno compromette l'assunzione secondo cui la regione bruciata può essere modellata come una semisfera ([2]).

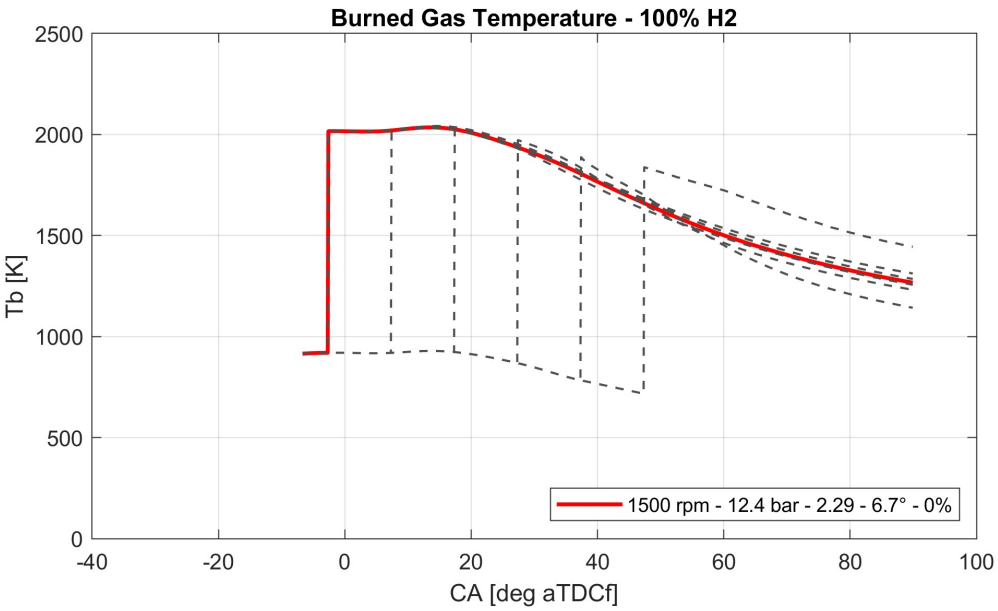
- In alcuni casi, come mostrato in figura 3.3c, le curve evidenziano un comportamento anomalo, caratterizzato da una repentina risalita seguita da una brusca discesa, un andamento non realistico e meritevole di ulteriori analisi.

In ogni caso, l'andamento delle velocità mostrato risulta abbastanza insufficiente, rendendo necessarie ulteriori indagini.

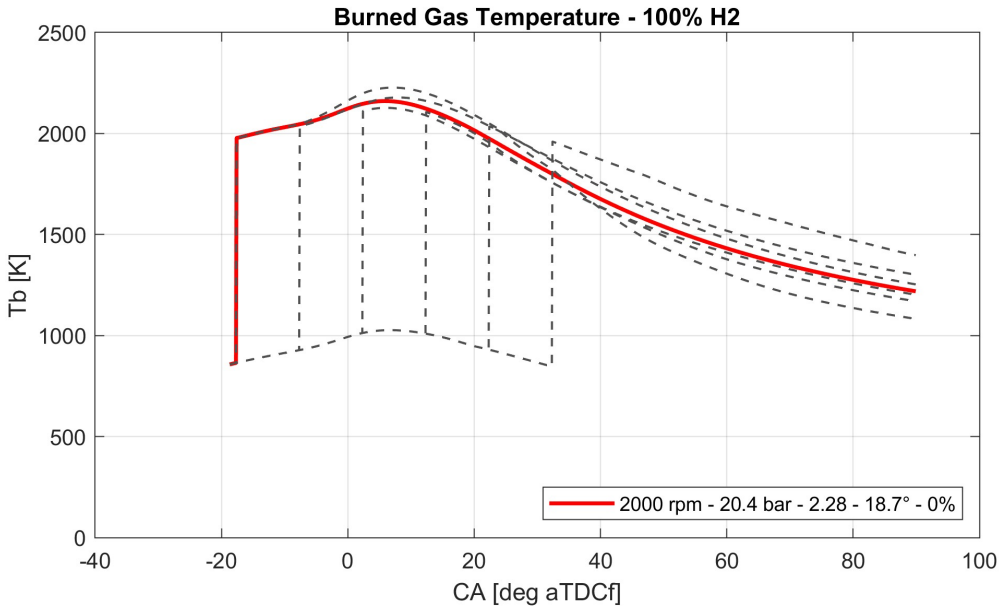
Infine, si procede all'analisi dei grafici relativi alla temperatura dei burned gas T_b e alle emissioni di NO_X.

In entrambi i grafici sono rappresentate sia le curve relative alle diverse zone, sia la curva corrispondente al valore medio. È fondamentale evidenziare che quest'ultima non è ottenuta tramite una semplice media aritmetica delle varie zone, ma viene calcolata dal modello attraverso una media ponderata, basata sul contenuto energetico di ciascuna zona.

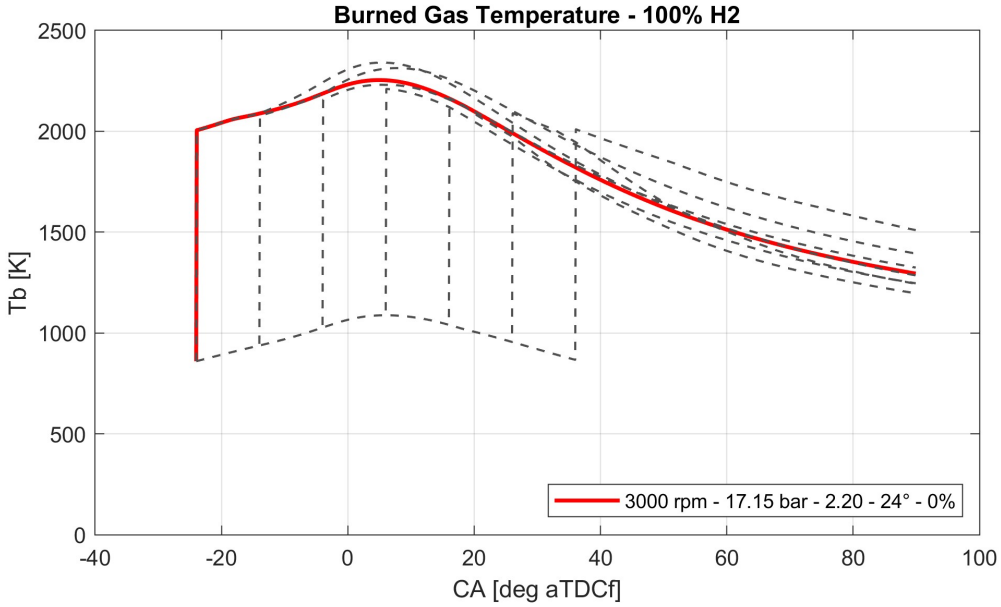
Un aspetto interessante da notare è che, a causa delle diverse durate della combustione nei due punti operativi analizzati, anche il numero di zone generate dal modello Multizone varia tra i due casi.



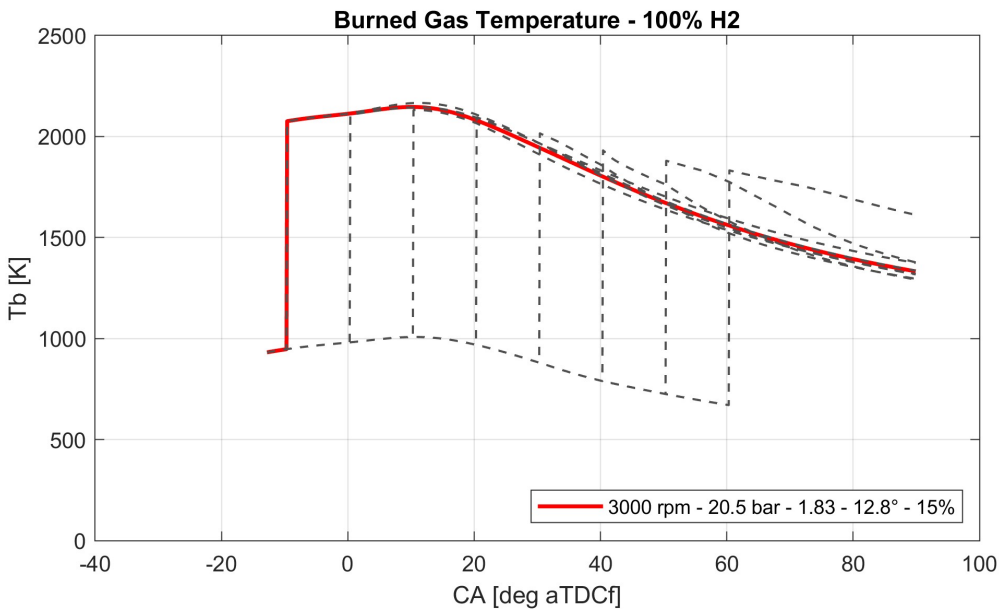
(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 2000 rpm - 20.4 bar - 2.28 - 18.7° - 0%

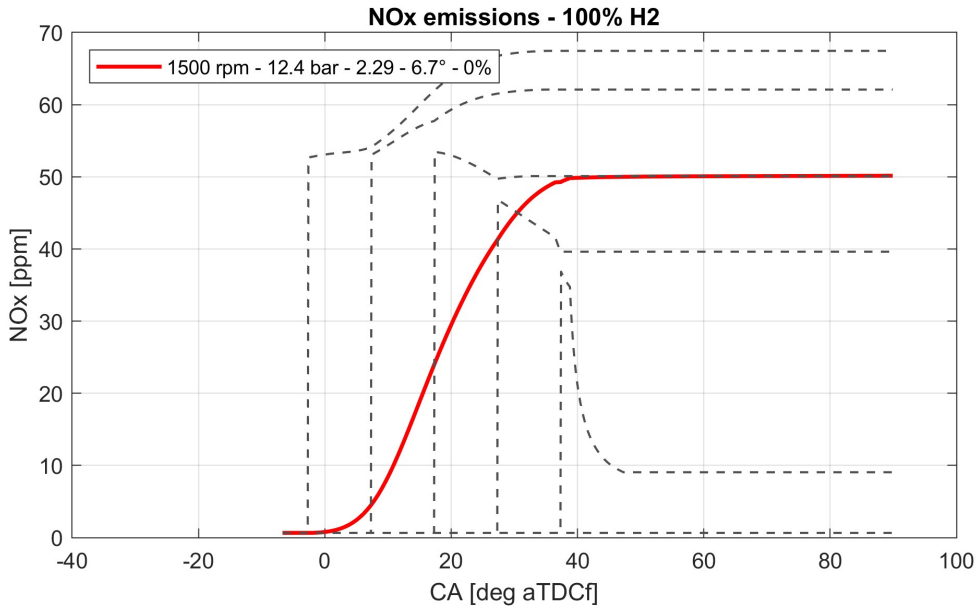


(c) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%

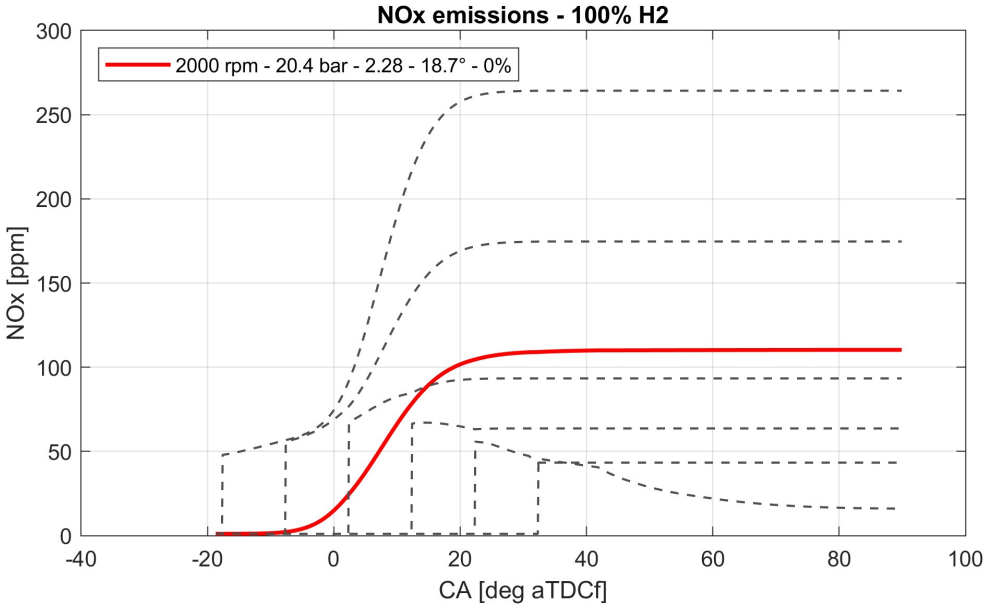


(d) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

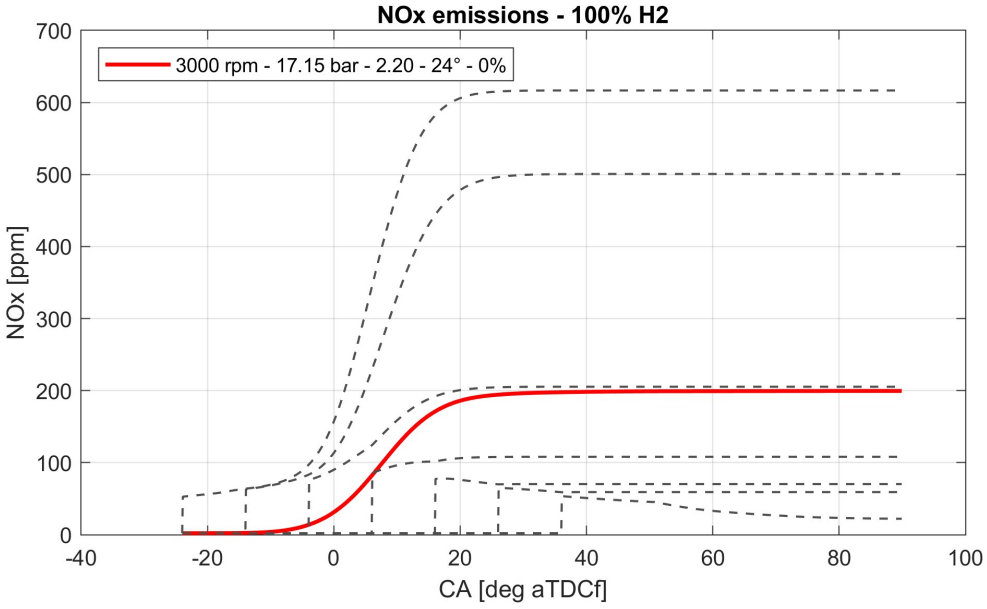
Figura 3.4: Temperature dei burned gas T_b, combustione 100% H_2



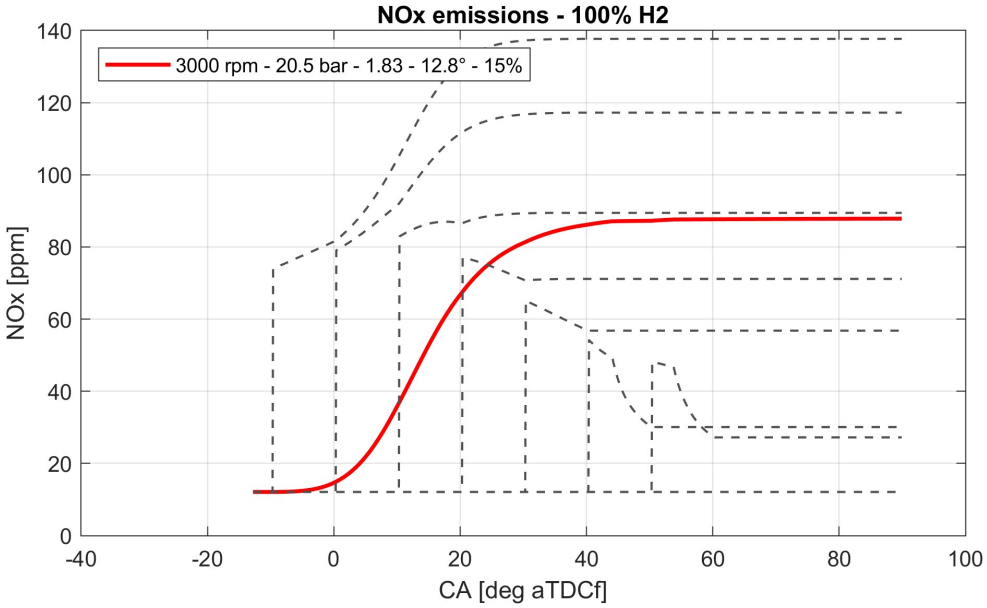
(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 2000 rpm - 20.4 bar - 2.28 - 18.7° - 0%



(c) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%



(d) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

Figura 3.5: Emissioni di NO_X, combustione 100% H_2

I principali parametri di combustione sono sintetizzati nella tabella seguente, in cui la numerazione segue l'ordine precedentemente definito nella Tabella 1.1:

N°	SOC [deg]	EOC [deg]	MFB10	MFB50	MFB1090	T_{max}[K]	NO_X[ppm]	η_c
1)	357.4	413.2	15.0	26.3	27.5	2035	50	0.98
2)	353.7	407.6	14.3	24.7	26.1	2082	64	0.98
3)	349.6	401.4	13.5	23.0	24.2	2136	91	0.98
4)	345.1	396.7	13.0	21.8	23.0	2170	126	0.98
5)	342.4	399.7	15.6	25.2	25.1	2160	110	0.98
6)	350.3	432.3	19.4	33.6	36.5	2158	70	0.98
7)	336.1	403.4	18.2	28.9	26.7	2254	200	0.98
8)	340.3	440.1	23.7	40.5	47.2	1937	25	0.90
9)	350.4	424.8	16.3	28.2	33.9	2146	88	0.92

Tabella 3.4: Parametri di combustione 100% H_2

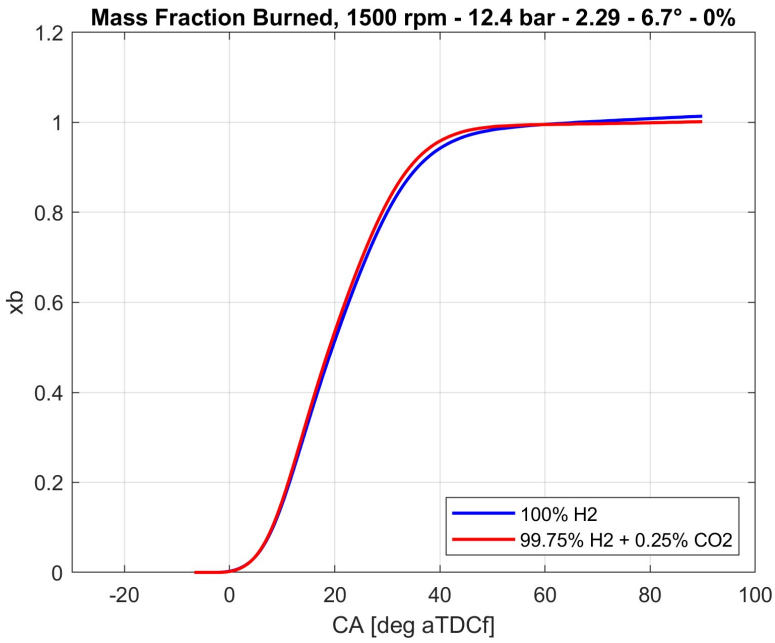
Si può osservare che il punto operativo 8) presenta evidenti criticità nel processo di combustione, caratterizzandosi per una durata della combustione eccessivamente prolungata. Tra le possibili cause di questo fenomeno vi è sicuramente la presenza di EGR, che tende a rallentare il processo di combustione e a comprometterne la qualità. Questo effetto risulta particolarmente significativo considerando che, per i valori di $IMEP$ e λ adottati (miscela molto magra), la qualità della combustione è già intrinsecamente ridotta.

3.2 Analisi comparative dei risultati ottenuti

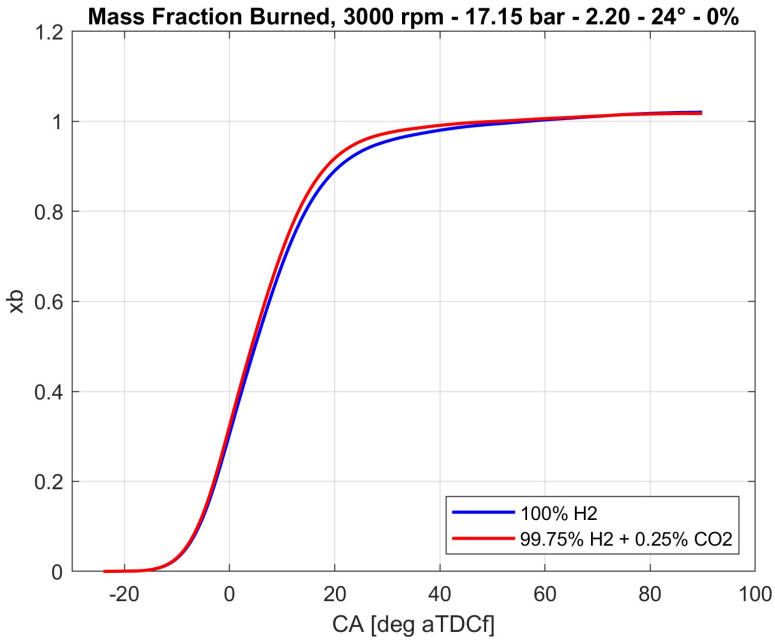
3.2.1 Effetti della presenza di CO_2 nella combustione dell'idrogeno

Passiamo ora ad analizzare il modo in cui il software gestisce la presenza di ulteriori specie nel combustibile e l'impatto di queste sulla variazione dei principali parametri diagnostici.

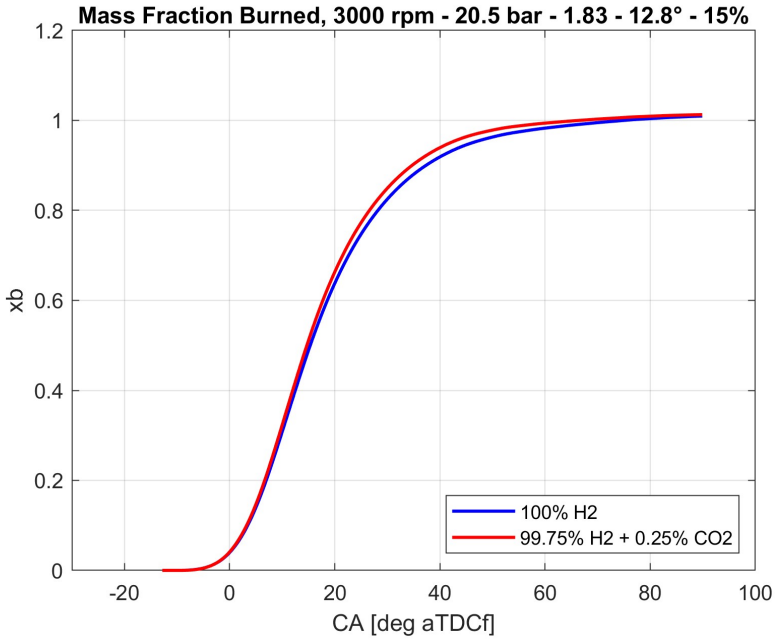
La frazione di massa bruciata x_b, mostrata in figura 3.6, presenta un andamento simile per entrambe le composizioni considerate. L'unica differenza significativa è che la curva di x_b relativa alla composizione contenente CO_2 risulta leggermente anticipata rispetto a quella della combustione pura di H_2, in ognuno dei punti motore considerati. Questo fenomeno è una conseguenza del principio su cui si basa la diagnostica pressure-based: poiché la pressione in camera di combustione è prefissata, il software interpreta un valore di pressione più alto rispetto a quello reale come un incremento della velocità di rilascio termico, determinando così un'anticipazione della curva della frazione di massa bruciata.



(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%

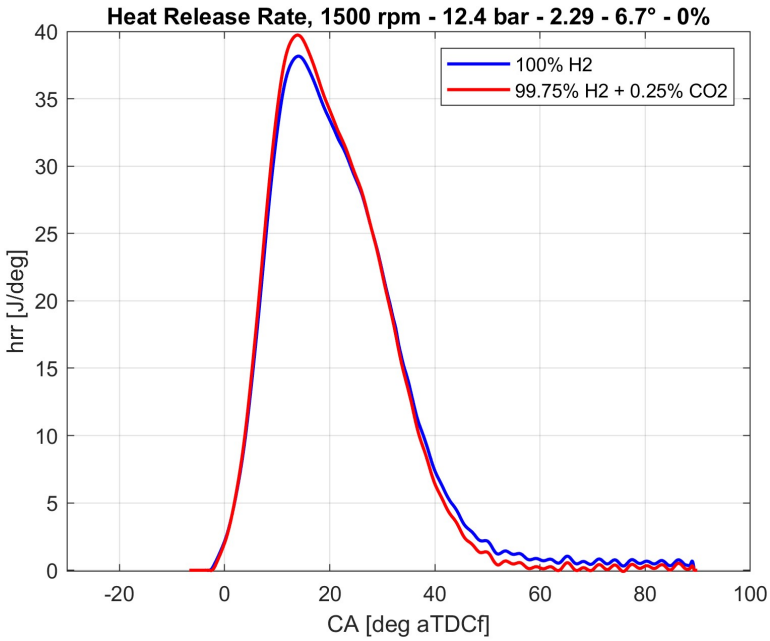


(c) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

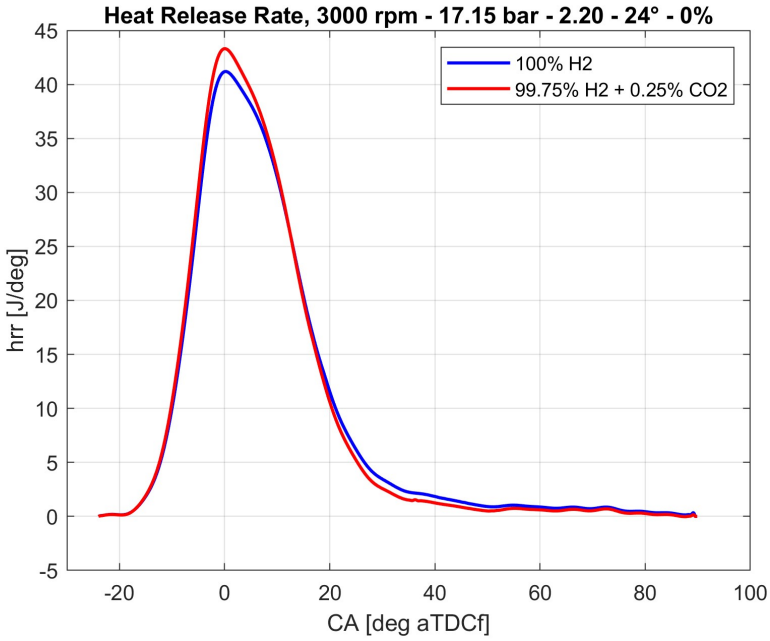
Figura 3.6: Mass Fraction Burned x_b, confronto composizione combustibile

In linea con quanto osservato per la frazione di massa bruciata x_b con-

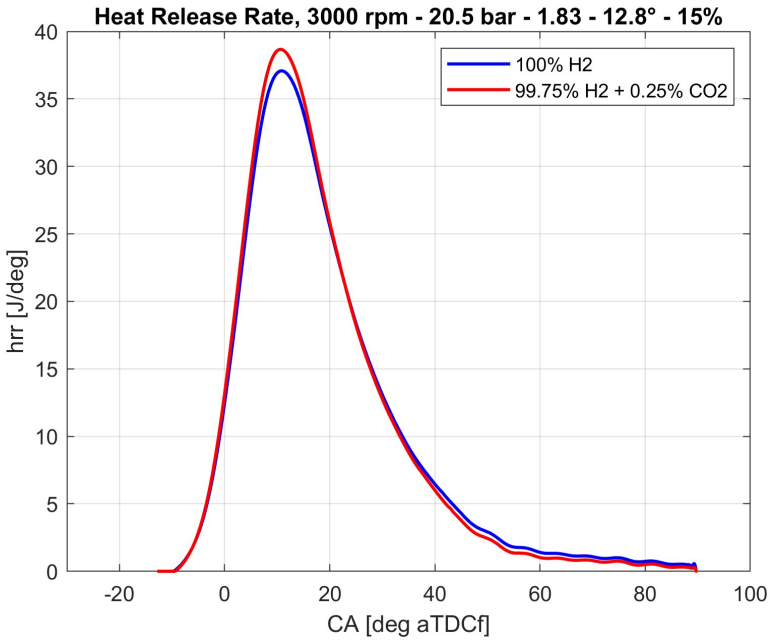
siderando il legame intrinseco tra questi due parametri, le curve del Heat Release Rate in figura 3.7 mostrano le medesime caratteristiche.



(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%

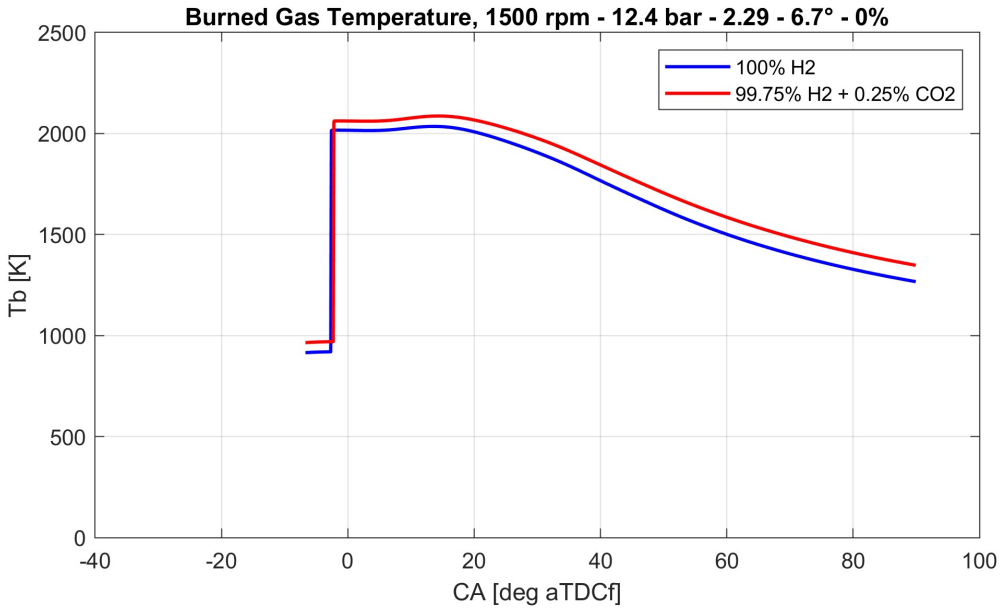


(c) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

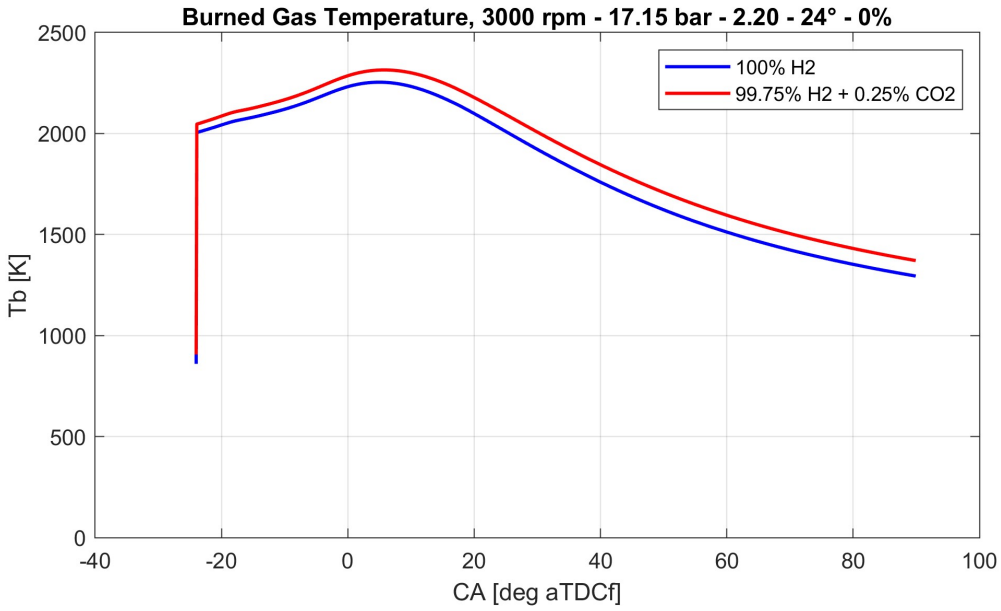
Figura 3.7: Heat Release Rate HRR, confronto composizione combustibile

Infatti, è evidente che, per ogni punto motore considerato, la curva della velocità di rilascio termico presenta valori di picco più elevati nel caso in cui sia presente CO_2.

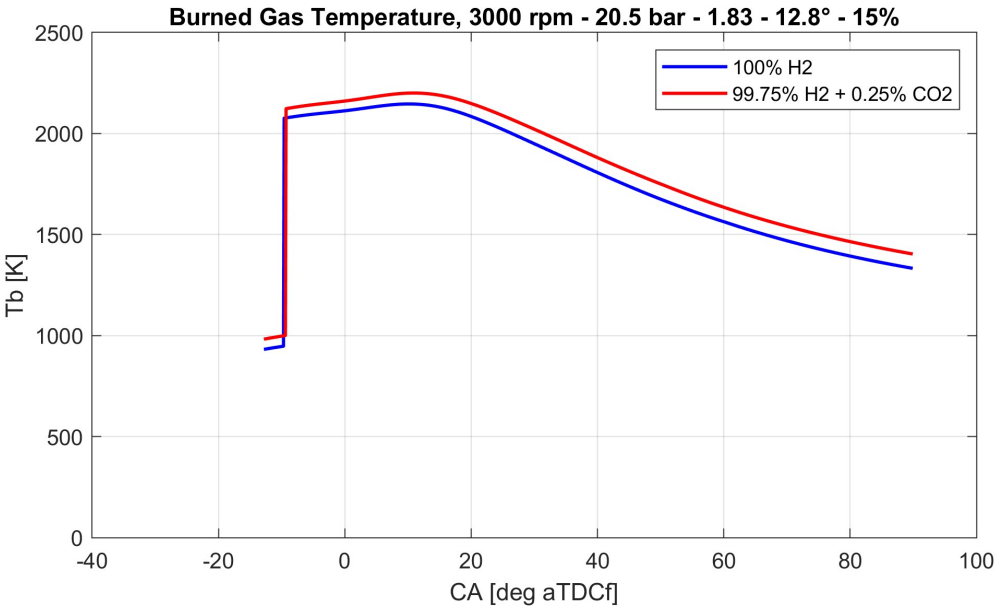
Infine, vengono analizzati gli effetti della presenza di CO_2 sulla temperatura dei burned gas T_b, in figura 3.8, e, di conseguenza, sui valori delle emissioni di NO_X, in figura 3.9. Per garantire una maggiore chiarezza e pulizia grafica, sono state riportate esclusivamente le curve medie, le quali sono state ottenute mediante una media ponderata basata sul contenuto energetico di ciascuna zona.



(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%

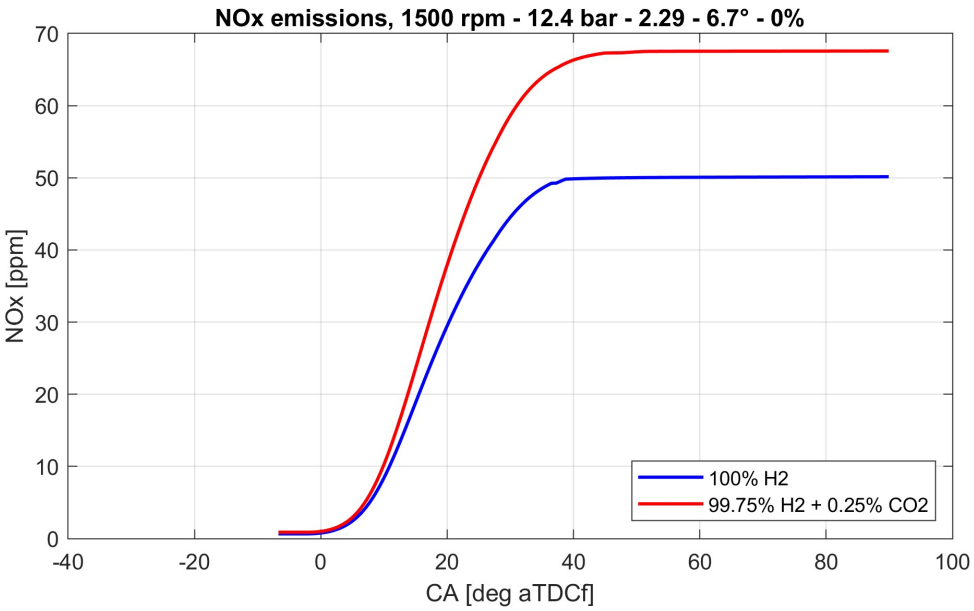


(b) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%

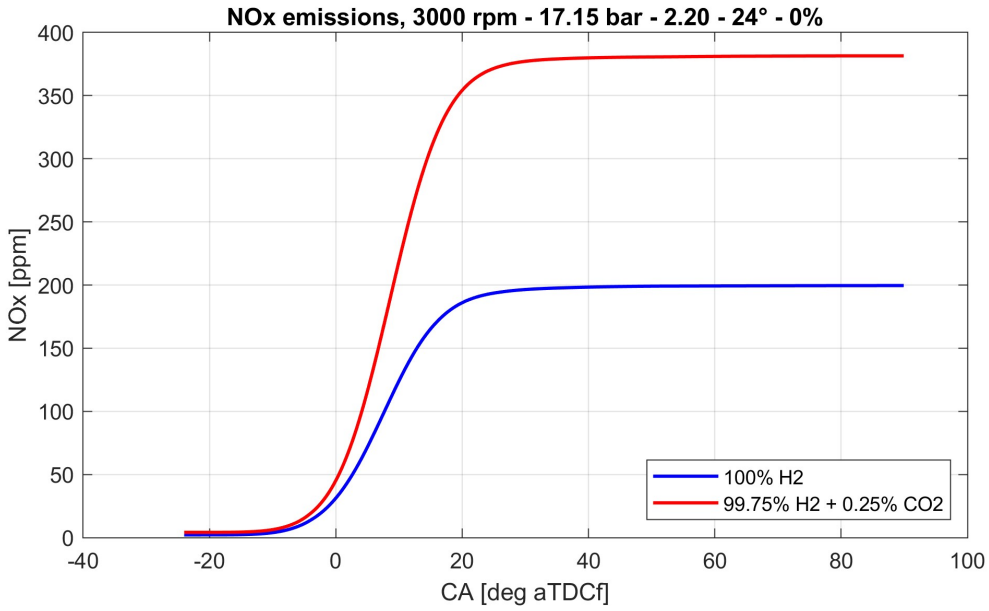


(c) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

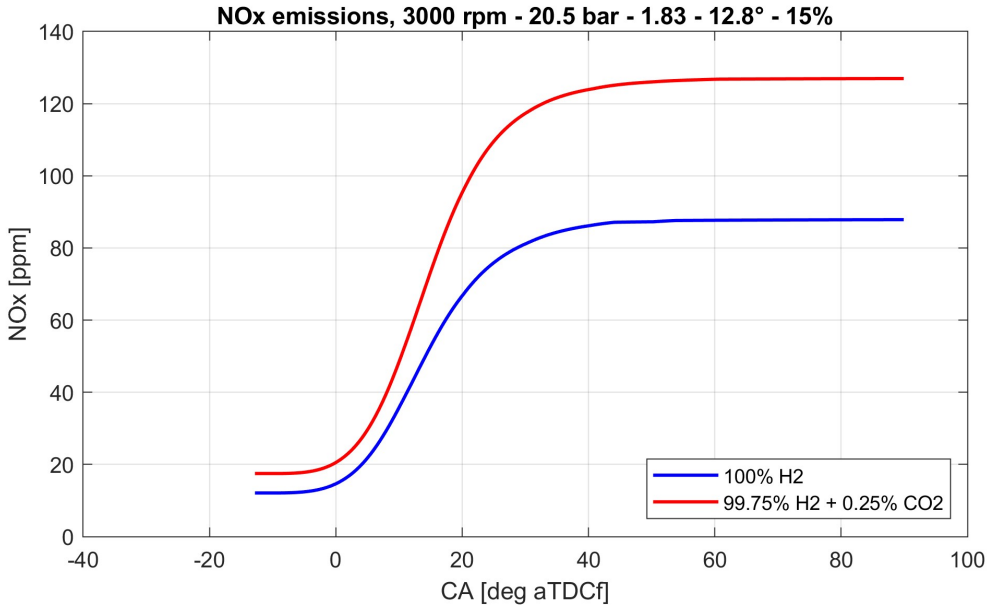
Figura 3.8: Temperature dei burned gas T_b, confronto composizione combustibile



(a) 1500 rpm - 12.4 bar - 2.29 - 6.7° - 0%



(b) 3000 rpm - 17.15 bar - 2.20 - 24° - 0%



(c) 3000 rpm - 20.5 bar - 1.83 - 12.8° - 15%

Figura 3.9: Emissioni di NO_X, confronto composizione combustibile

Come evidente in figura 3.8, le curve della temperatura media T_b risultano più elevate nel caso di combustione con presenza di CO_2 rispetto a quelle re-

lative alla combustione di solo idrogeno. Questo fenomeno è presumibilmente irrealistico, poiché una quantità così ridotta di CO_2 non dovrebbe influenzare significativamente le temperature e, se avesse un effetto, ci si aspetterebbe semmai una riduzione della curva rispetto alla combustione di solo idrogeno.

La ragione di questo problema è da attribuire alle scelte sui dati di input utilizzati, i quali sono descritti nel Capitolo 2.1.

Il pattern per il calcolo delle temperature è il seguente: $n_{stech} \rightarrow \alpha_{st} \rightarrow \alpha \rightarrow m'_{air} \rightarrow M \rightarrow R_u \rightarrow T$

- Reazione chimica di combustione in forma estesa:

$$E \cdot H_2 + L \cdot CO_2 + \frac{n_{stech}}{\phi}(O_2 + A \cdot N_2 + B \cdot CO_2 + CH_{abs}H_2O) \quad (3.2)$$

- Calcolo del numero di moli di O_2 stechiometrico n_{stech} :

$$n_{stech} = \frac{E}{2} \quad (3.3)$$

- Il rapporto stechiometrico viene calcolato come:

$$\alpha_{st} = \frac{m_{air}}{m_{fuel}} = \frac{n_{stech} \cdot (2 \cdot MM_O + 2A \cdot MM_N + B \cdot (MM_C + 2 \cdot MM_O))}{2E \cdot MM_H + L \cdot (MM_C + 2 \cdot MM_O)} \quad (3.4)$$

- Il rapporto A/F viene calcolato tramite la dosatura relativa λ:

$$\alpha = \alpha_{st} \cdot \lambda \quad (3.5)$$

- Di conseguenza, la portata d'aria m'_{air}:

$$m'_{air} = m'_{fuel} \cdot \alpha \quad (3.6)$$

- Perciò, la massa totale M di gas (aria + combustibile + gas residui) presente nel cilindro al termine della fase di aspirazione risulta:

$$M = \frac{\frac{m'_{air} \cdot m}{3600} \cdot (1 + \frac{1}{\alpha}) \cdot \frac{60}{n_{rpm} \cdot cilindri}}{1 - x_{bres}} \quad (3.7)$$

  con:

  - $m = 2$, (motori 4T)
  - $cilindri = 1$, numero di cilindri

- La temperatura media in camera T_b viene calcolata secondo la legge dei gas perfetti (tutta la carica ha proprietà corrispondenti agli unburned):

$$T_b = \frac{p \cdot 10^5 \cdot V}{M \cdot R_u} \tag{3.8}$$

Ecco la tabella con i dati calcolati per i due casi:

- caso 1): $100\% H_2$
- caso 2): $99.75\% H_2 + 0.25\% CO_2$

	Caso 1	**Caso 2**
$\boldsymbol{n_{stech}}$	0.5	0.499
$\boldsymbol{\alpha_{st}}$	34.16	32.39
$\boldsymbol{\alpha}$	78.23	74.17
$\boldsymbol{m'_{air}[kg/h]}$	49.46	46.90
$\boldsymbol{M[g]}$	1.12	1.07
$\mathbf{R_u}\left[\frac{\mathbf{J}}{\mathbf{kg \cdot K}}\right]$	337.4	337.3
$\boldsymbol{T_b[K]}$	915	965

Analizzando i termini che compongono l'equazione 3.8, possibile individuare la causa del problema:

- Il software diagnostico assume come dati di input fissi la pressione ed il volume degli unburned gas;
- La costante dei gas perfetti R_u diminuisce, seppur di una quantità minima, in maniera coerente, poiché la presenza di CO_2 aumenta la massa molare media degli unburned gas;
- Di conseguenza, l'elemento che fa variare maggiormente la temperatura media T_b è la massa totale in camera M. Infatti, poiché il software utilizza come valori fissi di input la portata di combustibile m'_{fuel} e la dosatura relativa λ, la riduzione della frazione molare dell'idrogeno comporta a cascata una diminuzione della portata d'aria aspirata m'_{air}, la quale, diminuendo, porta ad un aumento della temperatura.

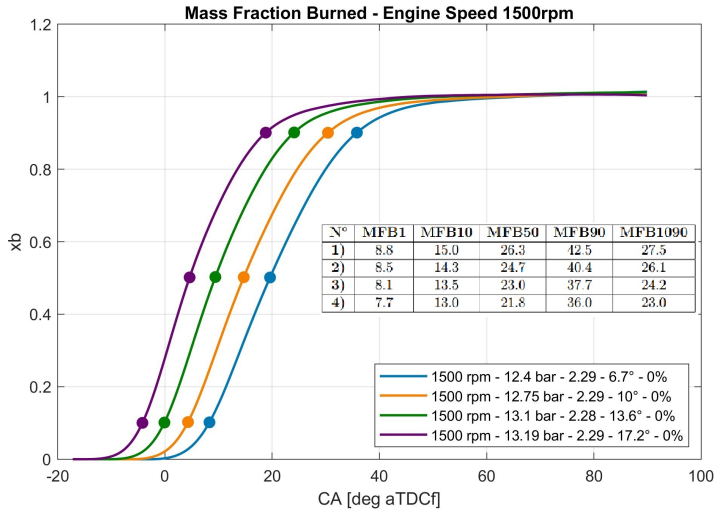
L'aumento delle temperature medie T_b comporta ovviamente un aumento delle emissioni di NO_X calcolate, come mostrato in figura 3.9.

Inoltre, è interessante osservare che, in 3.9c, le curve relative alle emissioni di NO_X iniziano da un valore non nullo. Questo fenomeno è attribuibile alla presenza di una percentuale significativa di EGR (Exhaust Gas Recirculation), che reintroduce in camera di combustione gas combusti provenienti dal ciclo precedente.

3.2.2 Confronto a Velocità angolare costante

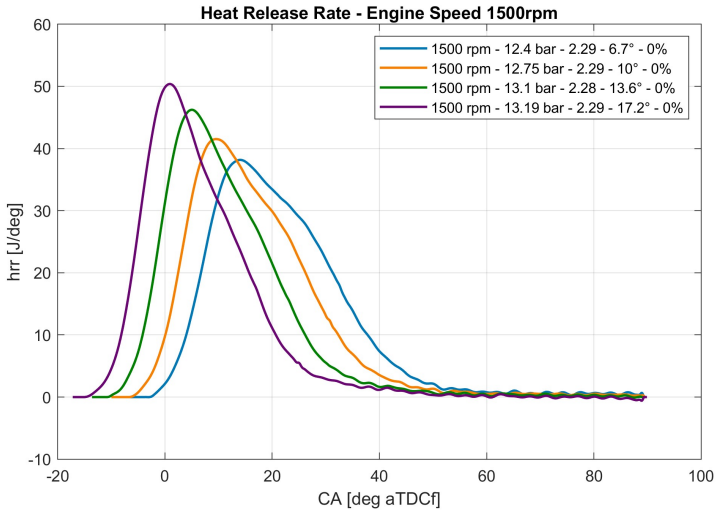
Vengono ora presentati i confronti tra curve ottenute a parità di velocità angolare, variando uno o più parametri.

Iniziamo l'analisi confrontando le curve ottenute per una velocità angolare $n_{rpm} = 1500rpm$:

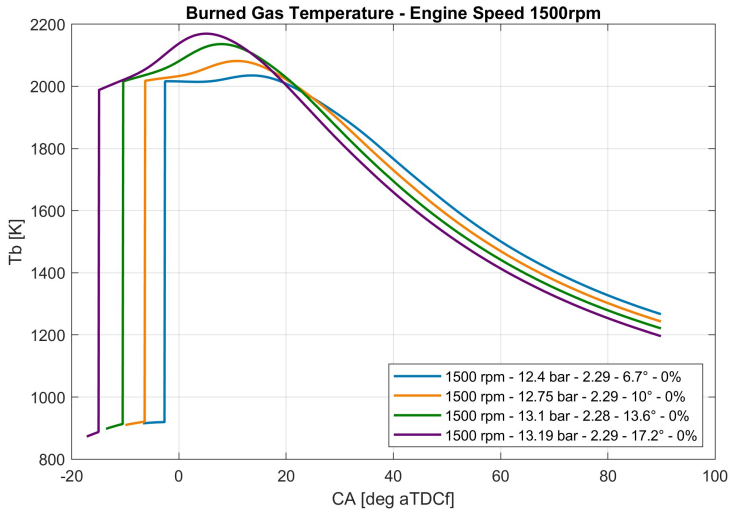


N°	MFB1	MFB10	MFB50	MFB90	MFB1090
1)	8.8	15.0	26.3	42.5	27.5
2)	8.5	14.3	24.7	40.4	26.1
3)	8.1	13.5	23.0	37.7	24.2
4)	7.7	13.0	21.8	36.0	23.0

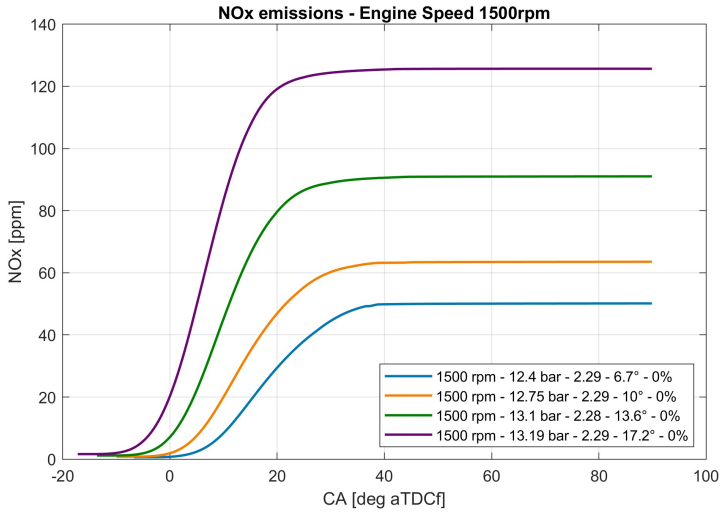
(a) Mass Fraction Burned x_b, combustione 100% H_2



(b) Heat Release Rate HRR, combustione 100% H_2



(c) Temperature dei burned gas T_b, combustione 100% H_2



(d) Emissioni di NO_X, combustione 100% H_2

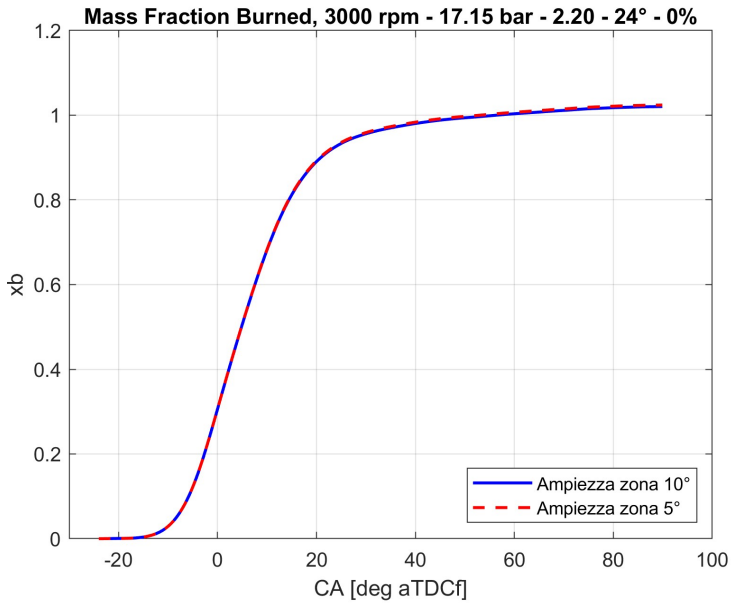
Figura 3.10: Confronto per velocità angolare $n_{rpm} = 1500rpm$, combustione 100% H_2

In figura 3.10a e 3.10b, si osserva l'effetto dell'anticipo di accensione (SA, Spark Advance) sui parametri di combustione: all'aumentare del SA, la combustione si verifica in una fase più anticipata e la velocità di rilascio termico risulta maggiore, poiché la combustione avviene a pressioni più elevate. Inoltre, si può notare come la qualità della combustione peggiori al diminuire della $IMEP$ e dello SA , poiché ci si allontana dalla condizione di MBT (Maximum Brake Torque).

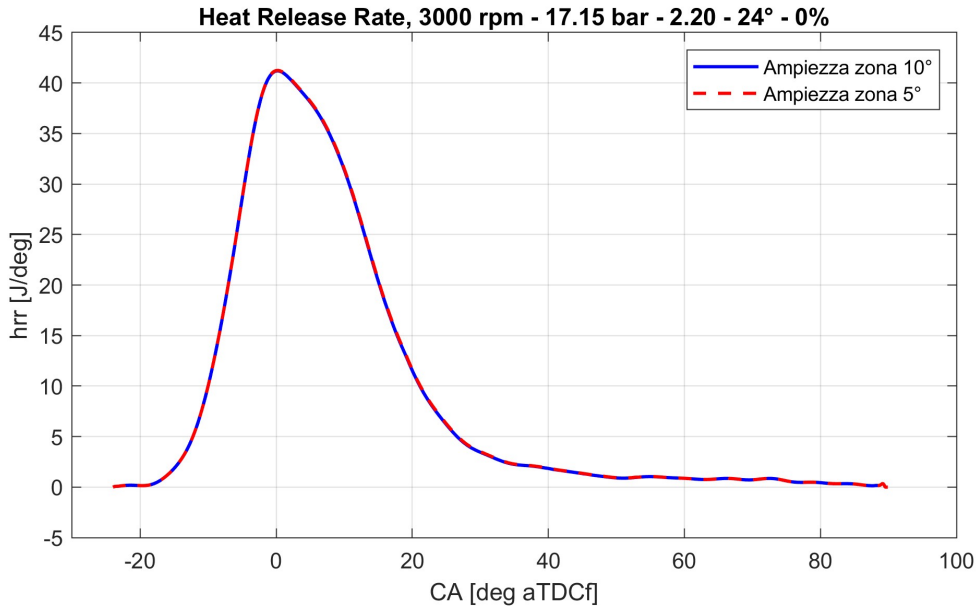
Allo stesso modo, in figura 3.10c, si osserva che una migliore qualità della combustione, in accordo con le considerazioni precedenti, determina un aumento significativo delle temperature di combustione. Questo, a sua volta, ha una conseguenza diretta sulla formazione di NO_X, in figura 3.10d, il cui tasso di produzione aumenta esponenzialmente con la temperatura T_b.

3.2.3 Analisi della sensibilità del modello alla riduzione dell'Angolo di ampiezza zona

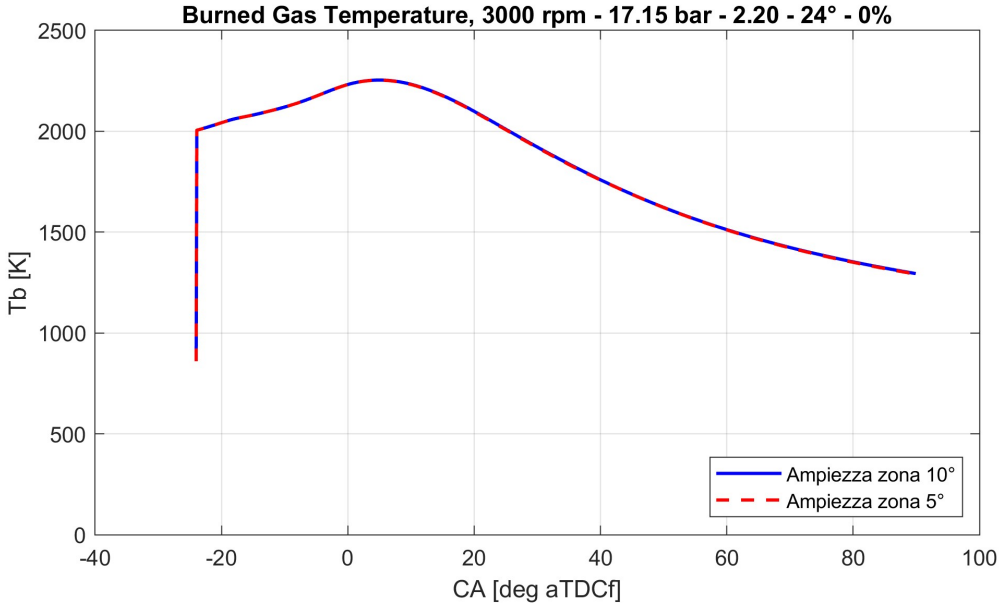
Per migliorare la precisione dei risultati ottenuti, sono state eseguite simulazioni con un angolo di ampiezza zona ridotto. Questo parametro definisce l'angolo dopo il quale il software genera una nuova zona di burned gas durante la fase di combustione. Riducendo tale angolo, si incrementa il numero di zone di discretizzazione spaziale, permettendo una rappresentazione più dettagliata dell'evoluzione della combustione.



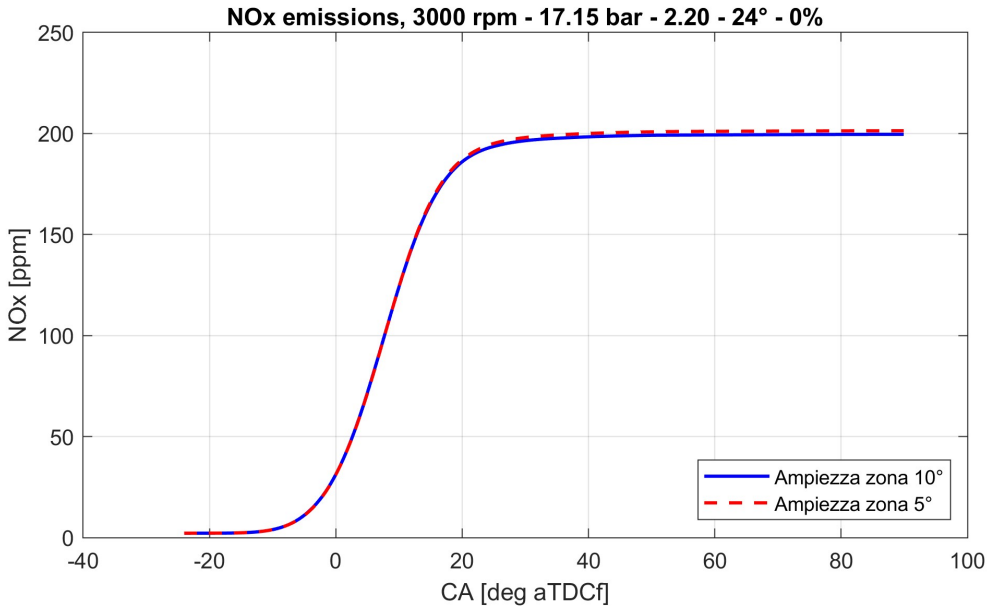
(a) Mass Fraction Burned x_b, confronto angolo ampiezza zona



(b) Heat Release Rate HRR, confronto angolo ampiezza zona



(c) Temperature dei burned gas T_b, confronto angolo ampiezza zona



(d) Emissioni di NO_X, confronto angolo ampiezza zona

Figura 3.11: Confronto per angolo ampiezza zona

Dall'analisi dei grafici in figura 3.11, risulta evidente che la riduzione dell'angolo di ampiezza zona non apporta un miglioramento significativo ai risultati. Infatti, le curve ottenute risultano quasi completamente sovrapposte, indicando che l'aumento della discretizzazione spaziale non ha un impatto rilevante sulla soluzione calcolata dal software.

3.2.4 Confronto tra le emissioni di NO_X calcolate e i valori sperimentali

La validazione dei risultati ottenuti dal modello di simulazione è un passaggio fondamentale per verificarne l'accuratezza e l'affidabilità. In questa sezione, si confrontano le emissioni di NO_X calcolate dal modello con i dati sperimentali misurati. L'obiettivo è valutare la capacità del modello di riprodurre fedelmente il comportamento reale delle emissioni, identificando eventuali discrepanze e le possibili cause di errore.

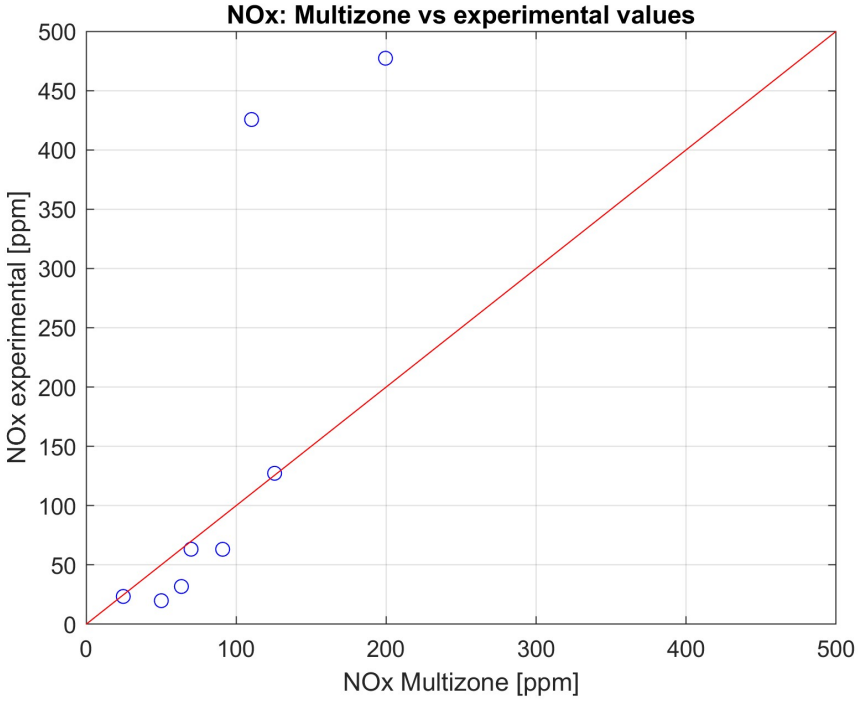


Figura 3.12: Confronto tra le emissioni di NO_X calcolate dal modello e i valori misurati sperimentalmente

Come evidente dalla figura 3.12, i valori di NO_X calcolati dal modello Multizona risultano complessivamente accettabili, in quanto generalmente non lontani dai valori sperimentali. Tuttavia, in alcuni punti di funzionamento del motore si osservano discrepanze più marcate rispetto ai dati misurati. Questo suggerisce la necessità di un'analisi più approfondita per comprendere le cause di tali differenze.

Capitolo 4

Conclusioni e Sviluppi Futuri

Il lavoro svolto ha permesso di estendere le funzionalità del software diagnostico per la simulazione della combustione nei motori a combustione interna, integrando il supporto per miscele interamente alimentate a idrogeno. Le modifiche implementate, in particolare l'adattamento del codice per il calcolo delle proprietà chimiche della miscela e l'ottimizzazione della gestione dei dati di input, hanno consentito di superare i vincoli del modello precedente, migliorando la flessibilità e la capacità di analisi del software.

L'aggiornamento del software contribuisce alla ricerca di soluzioni per la riduzione delle emissioni inquinanti nel settore dei trasporti, ponendosi come un valido strumento per studi avanzati sulla combustione di idrogeno. Tuttavia, sarà necessario perfezionare alcuni sotto-modelli all'interno del software, in particolare quello relativo alla formazione degli NO_X e al calcolo delle velocità di combustione tramite modello CAD, al fine di migliorare l'accuratezza dei risultati ottenuti.

Si potrebbero, inoltre, introdurre miglioramenti di tipo strutturale e ottimizzazioni dell'algoritmo per incrementare l'efficienza computazionale e ridurre i tempi di calcolo, rendendo il software più veloce e adatto a simulazioni complesse.

Infine, un'ulteriore validazione del modello potrebbe essere effettuata attraverso il confronto con dati sperimentali ottenuti su diverse configurazioni di motori, ampliando la gamma di applicazioni del software e affinando la sua accuratezza predittiva.

Bibliografia

[1] John B. Heywood. *Internal Combustion Engine Fundamentals 2E.* McGraw-Hill Education, 2018.

[2] Giuseppe Mottola. "Development of an Indicating Analysis and comparison with Multizone combustion diagnostics in a H2 DI ICE". Tesi di laurea mag. Politecnico di Torino, 2023.

[3] Alberto Vassalo. "Sviluppo di un metodo per l'analisi sperimentale delle velocità caratteristiche della combustione e della formazione di NOx in motori ad accensione comandata e relativa applicazione ad un motore bi-fuel". Tesi di dott. Politecnico di Torino, 2004.

[4] Andrea Catania, Daniela Misul, Ezio Spessa e Alberto Vassallo. "A Diagnostic Tool for the Analysis of Heat Release, Flame Propagation Parameters and NO Formation in SI Engines". In: *Proceedings of Comodia 2004.* Presented at Comodia 2004, Yokohama, Japan, August 2-5, 2004.

[5] Stefano D'Ambrosio, Daniela Misul, Ezio Spessa e Alberto Vassallo. "Evaluation of Combustion Velocities in Bi-fuel Engines by Means of an Enhanced Diagnostic Tool Based on a Quasi-Dimensional Multizone Model". In: *S.A.E. transactions.* ISSN 0096-736X, pp. 472-489, 2006.

[6] R. Miller, G. Davis, G. Lavoie, C. Newman e T. Gardner. "A Super-Extended Zel'dovich Mechanism for Nox Modeling and Engine Calibration". In: SAE Technical Paper 980781, 1998.

[7] G.A. Lavoie e P.A. Blumberg. "Measurements of NO Emissions from a Stratified Charge Engine: Comparison of Theory and Experiment". In: *Combustion Science and Technology.* Vol. 8, pp. 25-37, 1973.