



**Politecnico
di Torino**

Politecnico di Torino

Corso di Laurea Magistrale di Ingegneria Meccanica (LM-33)

A.A. 2024/2025

Sessione di Laurea Luglio 2025

**Validazione numerico-sperimentale
del modello G-equation applicato alla
combustione di miscele idrogeno
metano su motore RCEM**

Relatori:

Prof. Mirko Baratta

Prof. Daniela Anna Misul

Candidato:

Walther Giuseppe Lupelli

Correlatore:

Riccardo Sola

Indice

Abstract	9
1 L'idrogeno come combustibile alternativo	10
2 Setup del modello	12
2.1 Punti operativi	15
3 La CFD come strumento di risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes.....	16
3.1 Le equazioni di Navier-Stokes.....	16
3.2 I modelli di turbolenza.....	18
3.2.1 DNS	18
3.2.2 LES	19
3.2.3 RANS	20
Modello k- ϵ standard	20
Modello k- ϵ RNG	22
4 Modelli di combustione.....	23
4.1 Il concetto di regime flamelet e la separazione tra turbolenza e chimica	23
4.2 Il modello ECFM.....	24
4.3 Il modello G-equation.....	26
Correlazione di Peters.....	27
Modello di accensione	27
4.4 I modelli SAGE e CEQ	28
5 Meccanismi di cinetica chimica	29
5.1 Gri-Mech 3.0	30
5.2 C3 v3.5	32
6 Risultati numerici	34
Caso HR 0.25 $\Phi=1$	36
Caso HR 0.25 $\Phi=0.625$	38
Caso HR 0.5 $\Phi=1$	40
Caso HR 0.5 $\Phi=0.625$	42
Caso HR 0.75 $\Phi=1$	44
Caso HR 0.75 $\Phi=0.625$	46
Caso HR 1 $\Phi=1$	48
Caso HR 1 $\Phi=0.625$	50
Accesso ottico.....	52
Commenti generali	57
7 Conclusioni.....	63
Bibliografia.....	66

Ringraziamenti 69

Indice delle figure

Figura 1: vista frontale motore RCEM	13
Figura 2: vista in sezione della precamera	13
Figura 3: vista isometrica testa motore RCEM.....	14
Figura 4: modelli di turbolenza	18
Figura 5: diagramma di Borghi-Peters.....	23
Figura 6: pressione in camera-caso HR 0.25 stechiometrico.....	36
Figura 7: pressione in precamera-caso HR 0.25 stechiometrico.....	36
Figura 8: rilascio termico-caso HR 0.25 stechiometrico.....	37
Figura 9: frazione di massa bruciata-caso HR 0.25 stechiometrico.....	37
Figura 10: pressione in camera-caso HR 0.25 magro	38
Figura 11: pressione in precamera-caso HR 0.25 magro	38
Figura 12: rilascio termico-caso HR 0.25 magro	39
Figura 13: frazione di massa bruciata-caso HR 0.25 magro	39
Figura 14: pressione in camera-caso HR 0.5 stechiometrico.....	40
Figura 15: pressione in precamera-caso HR 0.5 stechiometrico.....	40
Figura 16: rilascio termico-caso HR 0.5 stechiometrico.....	41
Figura 17: frazione di massa bruciata-caso HR 0.5 stechiometrico.....	41
Figura 18: pressione in camera-caso HR 0.5 magro	42
Figura 19: pressione in precamera-caso HR 0.5 magro	42
Figura 20: rilascio termico-caso HR 0.5 magro	43
Figura 21: frazione di massa bruciata-caso HR 0.5 magro	43
Figura 22: pressione in camera-caso HR 0.75 stechiometrico.....	44
Figura 23: pressione in precamera-caso HR 0.75 stechiometrico.....	44
Figura 24: rilascio termico-caso HR 0.75 stechiometrico.....	45
Figura 25: frazione di massa bruciata-caso HR 0.75 stechiometrico.....	45
Figura 26: pressione in camera-caso HR 0.75 magro	46
Figura 27: pressione in precamera-caso HR 0.75 magro	46
Figura 28: rilascio termico-caso HR 0.75 magro	47
Figura 29: frazione di massa bruciata-caso HR 0.75 magro	47
Figura 30: pressione in camera-caso HR 1 stechiometrico.....	48
Figura 31: pressione in precamera-caso HR 1 stechiometrico.....	48
Figura 32: rilascio termico-caso HR 1 stechiometrico.....	49
Figura 33: frazione di massa bruciata-caso HR 1 stechiometrico.....	49
Figura 34: pressione in camera-caso HR 1 magro	50
Figura 35: pressione in precamera-caso HR 1 magro	50
Figura 36: rilascio termico-caso HR 1 magro	51
Figura 37: frazione di massa bruciata-caso HR 1 magro	51
Figura 38: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.25 stechiometrico	53
Figura 39: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.25 magro	53
Figura 40: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.5 stechiometrico	54
Figura 41: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.5 magro	54
Figura 42: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.75 stechiometrico	55
Figura 43: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.75 magro	55
Figura 44: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 1 stechiometrico	56
Figura 45: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 1 magro	56

Figura 46: anticipo di accensione numerico	58
Figura 47: calibrazione parametro b3-caso HR 0.25 magro	59
Figura 48: calibrazione parametro b3-caso HR 0.75 magro	59
Figura 49: andamento b3 in funzione di HR.....	60
Figura 50: picco pressione sperimentale vs numerico	61
Figura 51: errore relativo picco pressione sperimentale vs numerico	61
Figura 52: intervallo MFB 10-90 sperimentale vs numerico	62

Abstract

Il presente lavoro di tesi ha come obiettivo la calibrazione di un modello di combustione predittivo per un prototipo di motore RCEM (Rapid Compression Expansion Machine), alimentato con miscele di idrogeno e metano in diverse frazioni in massa ($25\%H_2-75\%CH_4$, $50\%H_2-50\%CH_4$, $75\%H_2-25\%CH_4$, $100\%H_2$), sia in condizioni stechiometriche che magre. La validazione del modello è stata condotta mediante simulazioni CFD tridimensionali utilizzando il software CONVERGE Studio.

L'interesse verso motori con geometria a precamera alimentati a idrogeno e metano nasce dalla volontà di esplorare configurazioni a basso impatto ambientale e ad alta efficienza: l'idrogeno, grazie al suo ampio intervallo di infiammabilità, alla bassa energia di accensione e all'elevata velocità di propagazione della fiamma laminare, risulta particolarmente adatto a funzionare anche in condizioni di carica molto magra; il metano invece, contribuisce alla stabilità della fiamma e garantisce emissioni di CO_2 contenute, rendendo la miscela combinata interessante sotto molteplici aspetti.

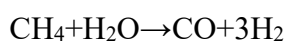
Per la modellazione del processo di combustione è stato adottato il modello G-equation, che rappresenta il fronte di fiamma come una superficie di discontinuità tra gas freschi e gas combusti. Tale modello è stato accoppiato al meccanismo chimico C3 v3.5, utilizzato per il calcolo delle velocità di fiamma laminari della miscela, fornite come input del modello.

L'obiettivo del lavoro è la definizione di un modello numerico robusto, in grado di riprodurre con buona approssimazione i risultati sperimentali in termini di andamento della pressione in camera di combustione e precamera, rilascio termico e frazione di massa bruciata, mantenendo al contempo costi computazionali contenuti. Rispetto a modelli che risolvono direttamente la chimica dettagliata delle reazioni che avvengono all'interno del fronte di fiamma, il G-equation consente di ridurre la complessità numerica e le esigenze di raffinatezza della mesh.

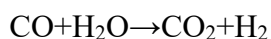
I risultati numerici sono stati confrontati sia con i dati sperimentali dei parametri fisici acquisiti, sia con le immagini registrate tramite accesso ottico al motore RCEM, al fine di valutare anche la coerenza qualitativa della progressione del fronte di fiamma all'interno della camera, ottenendo una buona correlazione numerico sperimentale soprattutto per miscele stechiometriche a basse frazioni di idrogeno. Le maggiori criticità sono emerse per miscele magre ad alto contenuto di idrogeno, probabilmente a causa della maggiore sensibilità del meccanismo chimico C3 v3.5 alle elevate concentrazioni di quest'ultimo, pur ottenendo risultati comparabili con altri modelli di combustione già validati.

1 L'idrogeno come combustibile alternativo

Lo scenario energetico mondiale sta subendo una rapida trasformazione, con l'esigenza di agire per ridurre le emissioni di gas climalteranti e la volontà di ridurre la dipendenza dai combustibili fossili, ora considerati responsabili della maggior parte dell'impatto antropico sull'ambiente. Nonostante i combustibili fossili abbiano agevolato lo sviluppo industriale nel corso degli ultimi due secoli, oggi presentano limitazioni evidenti dal punto di vista ambientale e della sostenibilità a lungo termine. Infatti, l'International Energy Agency, riferisce che nel 2023 oltre l'80% del consumo energetico mondiale è stato fornito da petrolio, carbone e gas naturale con una produzione complessiva di 36 miliardi di tonnellate di CO₂. Le pressioni normative, economiche e sociali hanno, dunque, accelerato la transizione verso fonti di energia più pulita e nell'ambito di queste problematiche, l'idrogeno si prospetta come una delle soluzioni più interessanti, e sarà considerato un vettore energetico alternativo e una forma di combustibile per i settori hard-to-abate: trasporto pesante e generazione stazionaria. L'idrogeno molecolare H₂ è l'elemento chimico più abbondante nell'universo, ma in natura sulla Terra non si trova in forma pura e deve esser prodotto con processi che hanno anch'essi un impatto ambientale. I principali metodi di produzione includono il reforming del metano con vapore acqueo (SMR), l'ossidazione parziale del metano, la gassificazione del carbone e l'elettrolisi dell'acqua. La produzione mondiale di idrogeno che sfrutta il reforming del metano rappresenta circa il 95% della produzione totale e coinvolge la seguente reazione, in cui il metano e l'acqua vengono convertiti in anidride carbonica e idrogeno:



La reazione è seguita dalla reazione di shift del monossido di carbonio:



Questo processo produce in media 9-10 kg di CO₂ per ogni kg di H₂, che sembra stia recidendo la linea di una filosofia rinnovabile nonostante la sua convenienza economica. L'idrogeno prodotto in questo modo è spesso definito "grigio". Con un sistema di cattura e stoccaggio dell'anidride carbonica (CCS) aggiunto alla catena di produzione, si ottiene l'idrogeno "blu", riducendo le emissioni ma con ulteriori costi associati. Infine, abbiamo l'idrogeno "verde", prodotto per elettrolisi dell'acqua con elettricità proveniente da fonti rinnovabili; è la soluzione più sostenibile, ma anche la più costosa e meno comune ora nel mix globale. Dal punto di vista termodinamico, l'idrogeno ha un potere calorifico superiore (PCS) di circa 141,8 MJ/kg e un potere calorifico inferiore (PCI) di 120 MJ/kg. Ad esempio, il metano ha un PCI pari a circa 50 MJ/kg. Tuttavia, la densità energetica volumetrica dell'idrogeno gassoso a condizioni standard è circa 10,8 MJ/m³, il che richiede compressioni fino a 700 bar, liquefazione a -253 °C o stoccaggio in una qualche forma chimica per renderlo competitivo in termini logistici.

Lo sfruttamento dell'idrogeno nei motori a combustione interna è un'idea che risale agli anni '70, ma solo di recente il suo effettivo sviluppo su larga scala è diventato una realtà, giustificato da alcune delle sue caratteristiche chimiche: è caratterizzato da una fiamma laminare di circa 2,65 m/s a pressione atmosferica (rispetto ai circa 0,4 m/s per il metano), ha un ampio intervallo di infiammabilità (4-75% in volume nell'aria), e una bassa energia di accensione (0,02 mJ). In altre parole, l'idrogeno è adatto a una combustione magra ed efficiente. Tuttavia, la temperatura di fiamma adiabatica molto elevata di circa 2318 K a condizioni stechiometriche è propizia per un'alta

produzione di NO_x . Quindi, sono necessarie tecniche di raffreddamento o una miscela stratificata per ridurre la produzione di tale inquinante.

Un compromesso parziale che è stato ampiamente studiato a livello scientifico e tecnologico è l'uso di miscele di idrogeno con metano. Questa soluzione intermedia unirebbe i vantaggi dei due combustibili, riducendo le emissioni complessive e migliorando l'efficienza di combustione. Le miscele H_2/CH_4 , meglio conosciute come Hythane, possono combinare la stabilità del metano con la reattività dell'idrogeno. La combustione di idrogeno conduce a una fiamma più veloce, abbattendo i tempi di accensione e aumentando l'efficienza del ciclo termodinamico. Innumerevoli esperimenti hanno dimostrato che fino al 20% in volume di idrogeno può essere implementato senza modifiche significative alle infrastrutture di distribuzione del gas e agli apparati di combustione.

Dall'altra parte, dal punto di vista sperimentale, un gran numero di ricercatori ha impiegato configurazioni RCEM (Rapid Compression Expansion Machine) per analizzare il comportamento delle miscele idrogeno-metano in condizioni controllate. In particolare, questi dispositivi consentono di simulare accuratamente le fasi di compressione, accensione e combustione di un motore reale, permettendo di acquisire curve di pressione in camera di combustione accurate, velocità di reazione e fenomeni legati alla formazione degli inquinanti. Un esempio è rappresentato da uno studio pubblicato su *Energy & Fuels* che conferma la riduzione significativa dei tempi di accensione per miscele H_2/CH_4 rispetto al metano puro, accompagnata da un incremento dell'efficienza termica e dalla ridotta produzione di emissioni nocive di monossido di carbonio (CO) e idrocarburi incombusti (HC). Tuttavia, la produzione di NO_x è sensibilmente aumentata a rapporti equivalenti a vicino all'unità, confermando la necessità dell'ottimizzazione dei parametri operativi e il raffreddamento dei gas combusti. Ancora, è essenziale considerare il comportamento meccanico dei materiali a contatto con l'idrogeno. L'idrogeno tende a diffondersi all'interno delle strutture cristalline dei metalli, portando ad una fragilità delle parti metalliche e al verificarsi della cricatura intergranulare, noto come *hydrogen embrittlement*. Pertanto, soluzioni ingegneristiche specifiche, come leghe o rivestimenti, devono essere adottate, specialmente in presenza di pressioni elevate. I materiali che possono essere utilizzati includono, ad esempio, acciai inossidabili austenitici e materiali compositi.

Complessivamente, l'integrazione di una piccola percentuale di idrogeno nei sistemi di combustione convenzionali, come il metano, rappresenta un approccio molto promettente alla graduale decarbonizzazione dei trasporti e dell'energia. Grazie a tale soluzione, possono essere sfruttati i vantaggi tecnici dell'idrogeno senza dover sostenere ingenti spese per le infrastrutture dovute al suo impiego puro.

Il seguente elaborato vuole inserirsi in questo ambito di ricerca, con l'intento di calibrare un modello di combustione predittivo per un prototipo di motore ICE alimentato con idrogeno puro e con miscele idrogeno-metano a differenti rapporti, partendo dal confronto dei dati sperimentali delle performance del motore con quelli ottenuti tramite software di simulazioni numeriche CFD.

2 Setup del modello

Il motore oggetto del presente elaborato è un prototipo di tipo RCEM (Rapid Compression and Expansion Machine), che, come discusso nel capitolo precedente, viene comunemente impiegato in ambito sperimentale per via della sua semplicità costruttiva e della capacità di replicare fedelmente alcune caratteristiche geometriche di un vero motore a combustione interna (ICE), quali il rapporto di compressione (CR), la corsa del pistone e il volume di spazio morto.

Nel modello RCEM, la corsa del pistone non è generata dal moto rotatorio di un albero motore, ma è riprodotta tramite uno stantuffo azionato elettricamente, in grado di simulare la velocità di rotazione di un ICE reale. Questo accorgimento consente di riprodurre in modo controllato e ripetibile la fase di compressione e di espansione, evitando la complessità meccanica legata alla cinematica del motore alternativo. Inoltre, a differenza di un motore convenzionale, l'RCEM è privo di condotti di scarico: i gas combusti non vengono evacuati, poiché l'analisi sperimentale si concentra esclusivamente sulla fase di combustione. Per tale motivo, sebbene venga spesso dichiarata una velocità di rotazione fittizia (in rpm), nella pratica viene eseguito un solo ciclo motore per ciascuna prova, con l'iniezione del combustibile limitata a quel singolo evento.

Il motore che si intende simulare mediante questa configurazione RCEM presenta una geometria di combustione a precamera passiva. Tale architettura prevede una camera di combustione principale tradizionale, alla quale è connessa una camera secondaria di volume ridotto (nell'ordine di pochi mm³) tramite quattro ugelli. All'interno della precamera si trova la candela di accensione, ed è in essa che viene iniettato il combustibile.

I sistemi a precamera rappresentano una soluzione tecnologicamente avanzata, in grado di migliorare significativamente la qualità della combustione grazie al mantenimento di alti livelli di turbolenza all'interno della camera principale durante l'intera fase di rilascio dell'energia. Nei primi istanti della combustione, la differenza di pressione tra la precamera e la camera principale innesca l'espulsione di una miscela di gas combusti e incombusti attraverso gli ugelli. Le ridotte sezioni di passaggio degli ugelli generano getti ad alta velocità che promuovono un'intensa turbolenza nella camera principale. Questo effetto si traduce in una combustione più rapida e più completa, fondamentale per garantire un rendimento termico elevato.

Come verrà approfondito nei capitoli successivi, la turbolenza svolge un ruolo determinante nel processo di combustione, in quanto agisce sull'evoluzione del fronte di fiamma, favorendo un'accelerazione delle reazioni chimiche in corso. In particolare, una sufficiente intensità turbolenta consente di mantenere la velocità di combustione in linea con i tempi fisici imposti dalla fase di espansione, che, a seconda della velocità di rotazione del motore, possono variare, ma sono generalmente dell'ordine di pochi millisecondi.

Un ulteriore vantaggio offerto dalla geometria a precamera è la possibilità di operare con miscele aria-combustibile molto magre, anche con rapporti di equivalenza (Φ) inferiori a 0,5, a seconda del tipo di combustibile impiegato. Questo consente una significativa riduzione delle emissioni inquinanti, in particolare degli ossidi di azoto (NO_x) e del monossido di carbonio (CO). Una tale strategia di combustione non è praticabile con configurazioni a camera singola, dove l'accensione e la propagazione della fiamma risultano più difficoltose in presenza di dosature magre, a causa della ridotta concentrazione di reagenti e delle temperature inferiori. Al contrario, nei sistemi a precamera, la turbolenza generata dai getti di gas combusti favorisce un'adeguata propagazione della fiamma anche in condizioni di scarsa reattività chimica, compensando così le limitazioni tipiche della combustione magra.

Di seguito sono riportate in figura le caratteristiche del motore RCEM in analisi con modellazione della geometria di camera e precamera su software di CFD Converge Studio.

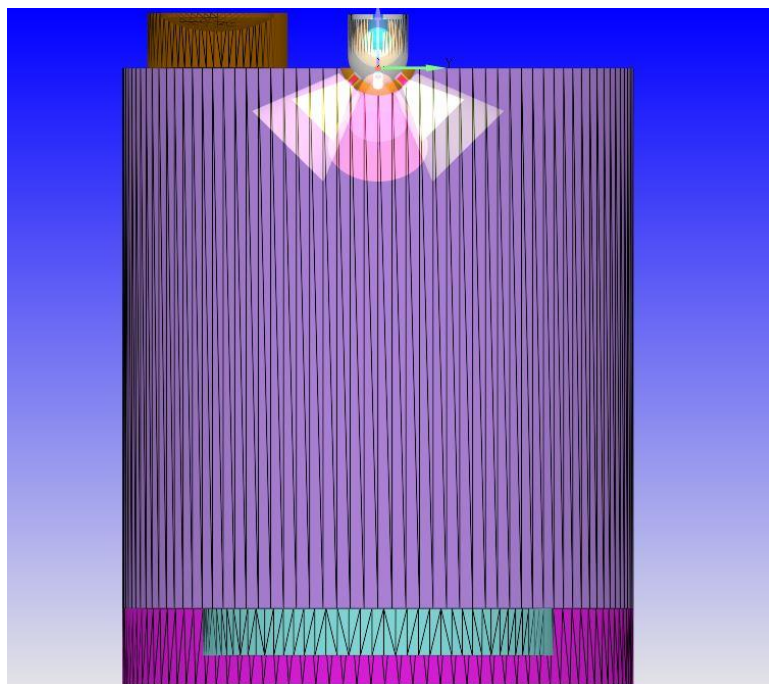


Figura 1: vista frontale motore RCEM

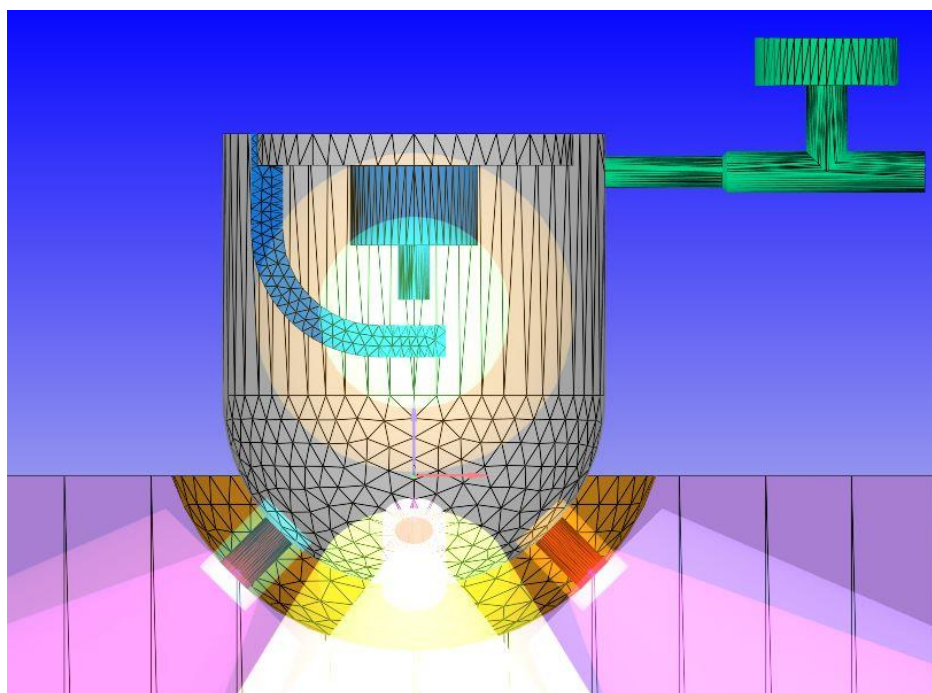


Figura 2: vista in sezione della precamera

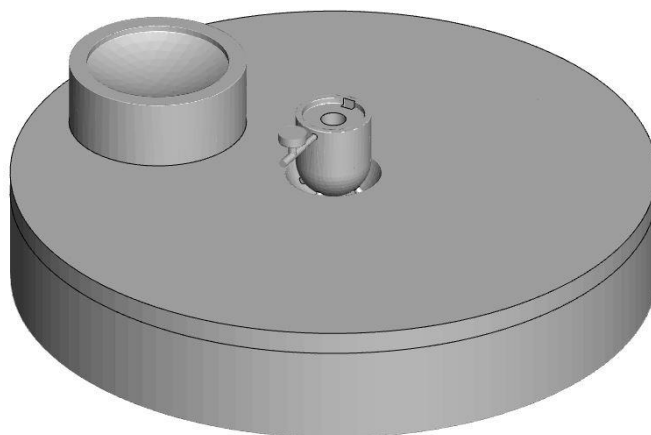


Figura 3: vista isometrica testa motore RCEM

Come anticipato in precedenza, dalle figure 1 e 3 si osserva che nella testa motore è presente solo il canale di aspirazione, dal quale viene prelevata la miscela aria-combustibile, assunta perfettamente premiscelata e omogenea in tutto il volume della camera di combustione. Invece in figura 2 è possibile osservare la struttura interna della precamera, costituita da un sensore di pressione esterno (rappresentato in verde), la candela e i suoi corrispettivi elettrodi, e i quattro fori di uscita dei gas verso la camera principale (*nozzles*). Le forme geometriche che in figura 2 sembrano investite da fasci di luce (le due sfere attorno la candela, i cilindri contenenti i *nozzles*, i coni uscenti dai fori della precamera) rappresentano quelle porzioni del dominio in cui si è optato per l'uso di una mesh più fine rispetto alla griglia di base (costituita da celle cubiche di dimensioni pari a 6,4 millimetri per lato), in quanto sono volumi di dimensioni ridotte ma al cui interno avvengono processi di combustione con elevati fenomeni di trasporto, per cui contengono al loro interno altissimi gradienti di pressione e temperatura. Sul software Converge, grazie alla possibilità di suddividere il volume complessivo del motore in diverse “*regions*”, è possibile introdurre i cosiddetti “fattori di scala” della mesh, e attribuire a ciascuna *region* il suo corrispettivo fattore di scala: tanto maggiore è il fattore di scala assegnato a una *region* e tanto maggiore sarà la discretizzazione della mesh tridimensionale in quel volume di controllo rispetto alla griglia di base. Nei software di calcolo numerico ciò viene fatto per tenere sotto controllo tutti quei fenomeni fisici che altrimenti verrebbero sottostimati dalla simulazione numerica influenzando negativamente sulla buona resa del modello. Un'altra funzione implementata in Converge per catturare meglio questi fenomeni è l'*Adaptive Mesh Refinement* (AMF), che adatta la struttura della mesh in funzione dell'evoluzione temporale del processo di combustione: grazie a questa funzione un volume qualsiasi della dominio può essere discretizzato in un certo istante con una mesh più grossolana in assenza di fenomeni di trasporto chimico o fluidodinamico rilevanti, mentre in altri istanti, per esempio durante l'attraversamento del fronte di fiamma, può essere utilizzata una mesh più fine.

Una volta definite le caratteristiche geometriche e di setup del motore, occorre spendere due parole sui casi studio presi in analisi.

2.1 Punti operativi

Definito l'*Hydrogen Ratio* (HR) come il rapporto tra la massa iniettata di idrogeno e la massa iniettata totale di idrogeno e metano ($HR = \frac{m_{H_2}}{m_{H_2} + m_{CH_4}}$), i punti operativi presi in considerazione sono:

- HR 0,25
- HR 0,5
- HR 0,75
- HR 1

Si è scelto di non prendere in considerazione il caso HR 0 (iniezione di metano puro) sia perché in letteratura sono già stati presenti studi numerico sperimentali sull'utilizzo del solo metano come combustibile, sia perché la presente trattazione rientra in uno studio numerico sperimentale sulle potenzialità delle miscele a base di idrogeno per motori ICE.

Converge richiede nel setup di input per le simulazioni numeriche l'elenco di tutte le specie reagenti coinvolte (trattandosi di miscele aria-idrogeno-metano le specie in questione sono H_2 , CH_4 , O_2 , N_2) con le loro relative frazioni in massa. Per ogni caso HR sono state effettuate prove sperimentali su miscela stechiometrica ($\phi = 1$) e su miscela magra ($\phi = 0,625$), per un totale di 8 prove sperimentali, alle quali corrisponderanno altrettante simulazioni numeriche. Tutte le prove sono state condotte alla velocità ideale dell'albero motore di 900 rpm, a cui corrisponderà un certo andamento della velocità lineare dello stantuffo del motore RCEM secondo una funzione di tipo sinusoidale, opportunamente calibrata sia tramite controllore elettronico nel motore stesso sia tramite il software di calcolo su Converge. Infine, per tutte le prove sperimentali è stato adottato un anticipo di accensione di 10 gradi prima del punto morto superiore ($SA = -10^\circ$).

3 La CFD come strumento di risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes

Negli ultimi decenni, la simulazione numerica ha assunto un ruolo di primo piano nell'ingegneria moderna per progettare, sviluppare ed esaminare sistemi complessi. In particolare, la fluidodinamica computazionale, comunemente nota con l'acronimo CFD (Computational Fluid Dynamics), costituisce ormai uno strumento imprescindibile per indagare i fenomeni di flusso e trasmissione termica dei fluidi, consentendo di risolvere con crescente precisione problematiche che un tempo richiedevano costosi ed estesi esperimenti. La CFD si basa sulla discretizzazione delle equazioni di Navier-Stokes, disciplinanti il comportamento dei fluidi newtoniani viscosi, e permette la modellizzazione di moti laminari e turbolenti, stazionari o transitori, su geometrie complesse e con condizioni al contorno realistiche.

L'impiego della CFD ha trovato vasta applicazione in molteplici settori: aerospaziale, automobilistico, biomedico, energetico, e soprattutto nei motori a combustione interna, dove la simulazione delle fasi di aspirazione, compressione, combustione ed espulsione dei gas pone una sfida dal punto di vista numerico e modellistico. In particolare, nei motori con combustione in camera a struttura articolata, come quelli con precamera, la CFD consente di analizzare con precisione la dinamica della turbolenza e l'interazione con i fronti di fiamma.

Affinché una simulazione CFD sia attendibile, è fondamentale comprendere la natura delle equazioni di base, le ipotesi che ne derivano e i metodi di chiusura adottati per trattare la turbolenza, fenomeno che, a causa della sua natura caotica e tridimensionale, rappresenta la principale fonte di complessità nella simulazione numerica dei flussi reali. Questo capitolo si propone quindi di fornire un quadro generale delle equazioni fondamentali, seguito da un approfondimento sui modelli di turbolenza più comunemente impiegati nella simulazione CFD di flussi turbolenti.

3.1 Le equazioni di Navier-Stokes

Le equazioni dei Navier-Stokes descrivono il campo di moto di un fluido viscoso, e derivano dalla legge di conservazione della massa (equazione di continuità), della quantità di moto (seconda legge di Newton applicata a un fluido) e dell'energia. Per un fluido comprimibile è un insieme di equazioni differenziali non lineari accoppiate e dipendenti nello spazio e nel tempo:

- **Equazione di continuità (conservazione della massa)**

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$$

- **Equazione della quantità di moto**

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \vec{f}$$

dove τ è il tensore degli sforzi viscosi e $\vec{f}$ rappresenta il campo delle forze di volume

- **Equazione dell'energia**

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho E + p)\vec{u}] = \nabla \cdot (\vec{u} \cdot \tau) - \nabla \cdot \vec{q} + \rho \vec{f} \cdot \vec{u}$$

dove E è l'energia totale massica e $\vec{q}$ è il flusso di calore (solitamente modellato secondo la legge di Fourier: $\vec{q} = -k\nabla T$)

Il sistema risulta chiuso solo dopo aver introdotto equazioni costitutive, come l'equazione di stato dei gas perfetti $p = \rho RT$, e i modelli per la viscosità e la conduzione termica.

3.2 I modelli di turbolenza

La turbolenza è un fenomeno complesso e difficile da comprendere, con caratteristiche tridimensionali, dinamiche e instabili. Nella pratica ingegneristica, è impossibile risolvere analiticamente le equazioni di Navier-Stokes per flussi turbolenti, e per questo motivo è necessario utilizzare modelli semplificati in grado di rappresentare gli effetti “medi”. Tali approcci si differenziano in base al compromesso di bilancio tra accuratezza e costi computazionali di calcolo.

I principali metodi disponibili sono: la DNS (Direct Numerical Simulation), teoricamente la più accurata, la LES (Large Eddy Simulation), una via di mezzo, e infine i modelli RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes), la scelta più diffusa per applicazioni industriali grazie ai minori requisiti computazionali. La figura seguente riassume qualitativamente le scale risolutive dei tre modelli in questione per un qualunque flusso turbolento.

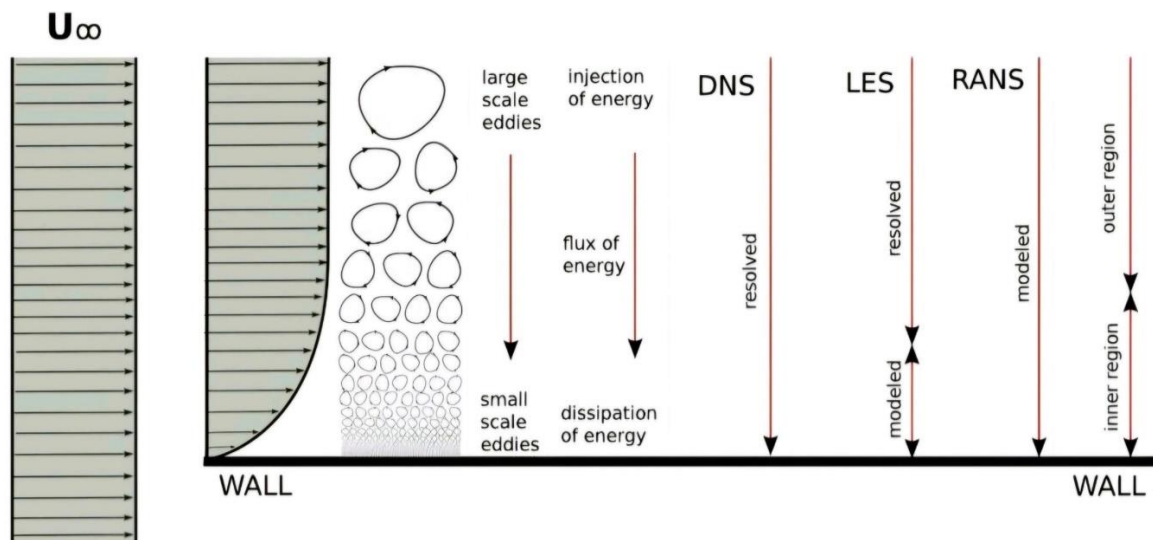


Figura 4: modelli di turbolenza

3.2.1 DNS

La risoluzione diretta delle equazioni di Navier-Stokes priva di qualsiasi modellazione della turbolenza costituisce la Direct Numerical Simulation. Ciò significa che tutte le scale turbolente, da quella più grande fino alla microscala di Kolmogorov, vengono catturate dalla discretizzazione numerica, il che richiede una griglia estremamente fitta e passi temporali molto ridotti.

Per questo motivo, la DNS è limitata a flussi semplici, numeri di Reynolds moderati e geometrie fortemente semplificate. In termini computazionali, il numero di gradi di libertà N necessari alla DNS cresce con il numero di Reynolds secondo una relazione asintotica del tipo $N \propto Re^{9/4}$. Nonostante non sia praticabile per applicazioni ingegneristiche complesse, la DNS costituisce uno strumento fondamentale per lo sviluppo e la convalida di modelli di turbolenza ridotti, fornendo dati di riferimento di altissima fedeltà.

3.2.2 LES

La Large Eddy Simulation è una tecnica di modellazione della turbolenza che si basa sulla separazione delle scale turbolente mediante filtraggio spaziale. I vortici di grande scala, contenenti la maggior parte dell'energia cinetica turbolenta e responsabili della maggior parte del trasporto di quantità conservate (massa, quantità di moto, energia), vengono risolti direttamente. Le strutture più piccole, invece, vengono modellate tramite un modello subgrid-scale (SGS).

Applicando un'operazione di filtro spaziale alle equazioni di Navier-Stokes, si ottiene un sistema filtrato in cui compare il tensore di Reynolds subgriglia:

$$\tau_{ij}^{SGS} = \overline{u_i u_j} - u_i u_j$$

che deve essere modellato per chiudere il sistema.

Il modello SGS più comunemente utilizzato è quello di Smagorinsky, il quale assume che la viscosità turbolenta SGS sia proporzionale al modulo del tensore di deformazione filtrato:

$$\mu_t^{SGS} = \rho (C_s \Delta)^2 |\bar{S}|$$
$$|\bar{S}| = \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}}$$

dove C_s è una costante empirica (≈ 0.2 per turbolenza isotropa) e Δ è la larghezza del filtro, comunemente assunta proporzionale alla dimensione della cella.

Per migliorare il comportamento vicino alle pareti, dove il modello di Smagorinsky tende a sovrastimare la viscosità, si impiega spesso un fattore di smorzamento (van Driest damping):

$$C_s(y^+) = C_{s0} (1 - e^{-y^+/A})^2$$

I modelli dinamici calcolano il valore del coefficiente C_s localmente e in tempo reale, migliorando la predizione nei flussi complessi e riducendo automaticamente la viscosità nelle zone in cui le piccole scale sono trascurabili. Un'alternativa è data dai modelli di similarità di scala, in cui si assume che i piccoli vortici risolti siano statisticamente simili a quelli non risolti. Questi modelli sono poco dissipativi ma ben correlati con i tensori SGS reali, e vengono spesso combinati con Smagorinsky in modelli "misti".

L'adozione di modelli LES in ambito industriale, compreso il settore motori, è in rapida crescita, soprattutto per i fenomeni transitori come la combustione in camera a precamera. Tuttavia, la sensibilità al filtraggio, la richiesta di mesh raffinate, e il costo computazionale superiore rispetto ai modelli RANS ne limitano ancora la diffusione sistematica.

3.2.3 RANS

L'approccio RANS si basa su un'operazione di media temporale (o ensemble) delle equazioni di Navier-Stokes. Attraverso la decomposizione di Reynolds:

$$\phi(x, t) = \bar{\phi}(x) + \phi'(x, t)$$

le equazioni del moto diventano mediate nel tempo, ma introducono nuovi termini, i cosiddetti sforzi turbolenti di Reynolds:

$$\tau_{ij}^{Re} = -\rho \overline{u'_i u'_j}$$

Tali termini richiedono modellazione per ottenere un sistema chiuso.

La chiusura più comune è quella basata sull'ipotesi di Boussinesq, che introduce una viscosità turbolenta μ_t come:

$$\tau_{ij}^{Re} = 2\mu_t \overline{S_{ij}} - \frac{2}{3}\rho k \delta_{ij}$$

dove k è l'energia cinetica turbolenta e $\overline{S_{ij}}$ è il tensore medio di deformazione. Per determinare μ_t , si introducono modelli di trasporto come il k- ϵ .

Modello k- ϵ standard

Il modello k- ϵ standard è uno dei modelli di turbolenza più utilizzati per la chiusura delle equazioni RANS, grazie alla sua relativa semplicità e stabilità numerica. Si tratta di un modello a due equazioni che introduce due variabili scalari supplementari:

- k : l'energia cinetica turbolenta, che rappresenta l'energia per unità di massa associata alle fluttuazioni del campo di velocità turbolento.
- ϵ : la dissipazione turbolenta, ovvero la velocità con cui l'energia cinetica turbolenta viene dissipata in energia interna (calore) per effetto della viscosità.

La viscosità turbolenta μ_t , che quantifica la capacità del flusso turbolento di trasportare quantità di moto, è modellata come:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon}$$

con C_μ costante empirica solitamente assunta pari a 0,09.

Le equazioni di trasporto per k e ε sono rispettivamente:

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} k) = P_k - \rho \varepsilon + \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right]$$

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \varepsilon) = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right]$$

Dove:

- P_k è il termine sorgente di energia cinetica turbolenta, definito da:

$$P_k = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$$

che rappresenta il trasferimento di energia cinetica dal campo medio al campo turbolento;

- μ è la viscosità dinamica molecolare;
- $\sigma_k, \sigma_\varepsilon$ sono rispettivamente i numeri di Prandtl turbolenti per k ed ε ;
- $C_{\varepsilon 1}, C_{\varepsilon 2}$ sono costanti empiriche.

Il modello k - ε standard è indicato per flussi completamente sviluppati e isotropi, e offre risultati affidabili in condizioni stazionarie e con geometrie semplici. Tuttavia, tende a sottostimare gli effetti nei flussi a forte curvatura, separazione o swirl, dove le ipotesi di isotropia e omogeneità della turbolenza non sono più valide.

Modello k-ε RNG

Il modello k-ε RNG (Renormalization Group) è una versione avanzata del modello k-ε standard, derivata da un approccio teorico più rigoroso basato sulla teoria dei gruppi di rinormalizzazione (Yakhot e Orszag, 1986), tenendo conto in modo più sistematico delle fluttuazioni turbolente su un ampio intervallo di scale.

Le principali differenze rispetto al modello standard riguardano:

- la forma modificata dell'equazione di trasporto per ε, con un termine correttivo addizionale:

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \varepsilon) = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k + \beta \varepsilon / R_\eta} + \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right]$$

con $R_\eta = \frac{Sk}{\varepsilon}$, dove S è un parametro di scala legato al tasso di deformazione media del flusso:

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

β è una costante correttiva pari a circa 0,012;

- un'espressione più complessa per la viscosità turbolenta, dipendente da parametri locali del flusso:

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon}$$

dove C_μ stavolta non è costante ma varia localmente in funzione della turbolenza;

Queste modifiche migliorano la risposta del modello in presenza di elevati gradienti di velocità, fenomeni di separazione, e flussi con anisotropia marcata, tipici delle condizioni all'interno di una precamera o di una camera turbolenta come nel caso del motore RCEM analizzato in questa tesi.

4 Modelli di combustione

Il motore a combustione interna a quattro tempi è il tipo di motore più comune nei veicoli leggeri, grazie alla sua semplicità e affidabilità. Il ciclo si articola in quattro fasi distinte, ognuna corrispondente a una corsa del pistone all'interno del cilindro. La prima fase è quella di aspirazione, durante la quale la valvola di aspirazione si apre e il pistone si muove verso il basso, generando una depressione che richiama la miscela aria-combustibile (o solo aria nei motori ad iniezione diretta) nel cilindro. Segue la compressione, nella quale entrambe le valvole sono chiuse e il pistone risale comprimendo la miscela fino a raggiungere una pressione e temperatura elevate. A questo punto, una scintilla generata dalla candela avvia la fase di combustione ed espansione. La combustione non è istantanea, ma si propaga sotto forma di fronte di fiamma dalla zona della candela verso il resto della camera. Il calore liberato aumenta bruscamente la pressione dei gas che spingono il pistone verso il basso, producendo lavoro meccanico. Infine, nella fase di scarico, la valvola di scarico si apre e il pistone risale nuovamente, espellendo i gas combusti. Questo ciclo si ripete migliaia di volte al minuto nei motori a regime nominale.

Nel contesto della simulazione CFD e della modellazione, il processo più critico è proprio quello della combustione: comprenderne la propagazione, la velocità della fiamma e la sua interazione con la turbolenza è fondamentale per poter ottimizzare potenza, efficienza e contenimento delle emissioni.

4.1 Il concetto di regime flamelet e la separazione tra turbolenza e chimica

Nel processo di combustione turbolenta, si identificano diversi regimi in base alla relazione tra le scale temporali e spaziali della chimica e della turbolenza. Queste relazioni sono ben descritte nel diagramma di Borghi–Peters, che consente di classificare i regimi di combustione tramite due numeri adimensionali fondamentali: il numero di Damköhler (Da) e il numero di Karlovitz (Ka).

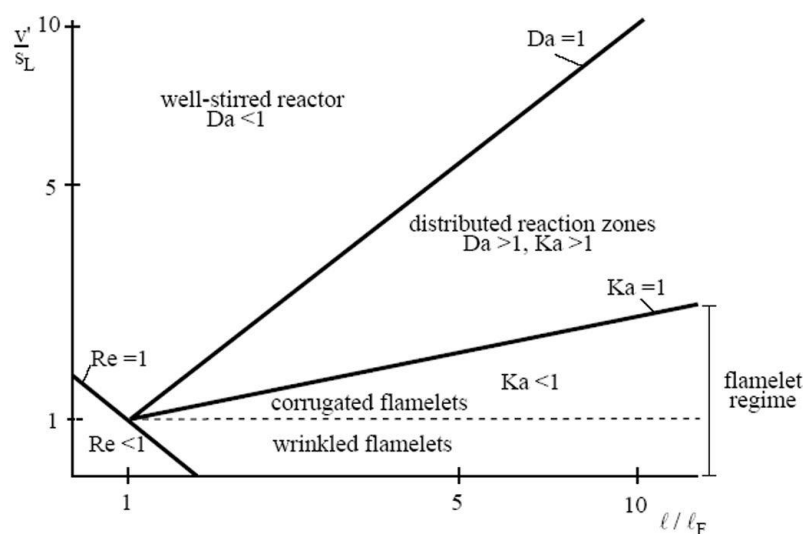


Figura 5: diagramma di Borghi-Peters

Il numero di Damköhler rappresenta il rapporto tra il tempo caratteristico della turbolenza τ_t e quello della reazione chimica τ_c :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$$

Un valore $Da \gg 1$ indica che la chimica è molto più veloce della turbolenza: è il tipico regime flamelet, dove il fronte di fiamma è sottile e ben definito. Al contrario, $Da \ll 1$ indica che la turbolenza domina e la reazione è limitata dalla chimica stessa.

Il numero di Karlovitz (Ka) invece mette in relazione la scala chimica con la scala più piccola della turbolenza (scala di Kolmogorov η):

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta}$$

Quando $Ka < 1$, nemmeno le strutture turbolente più piccole riescono a penetrare il fronte di fiamma, che si comporta ancora come una fiamma laminare distorta dalla turbolenza: questo è il regime flamelet. Quando invece $Ka > 1$, siamo nel regime di fiamma ispessita (thickened flame).

Nel regime flamelet, largamente prevalente nei motori SI, è lecito assumere che i fenomeni chimici e turbolenti siano separabili, poiché hanno due scale temporali differenti. Ciò permette di modellare il fronte di fiamma come una superficie di discontinuità propagante, evitando di dover risolvere esplicitamente tutte le reazioni chimiche turbolente; il solo effetto della turbolenza è quello di corrugare il fronte di fiamma, aumentandone la superficie a contatto con i gas freschi, senza alterarne la velocità di propagazione. Questa assunzione, seppur errata dal punto di vista fisico, è alla base di modelli di combustione numericamente robusti e allo stesso tempo meno onerosi in termini computazionali come ECFM e G-equation.

4.2 Il modello ECFM

Il modello ECFM - *Extended Coherent Flame Model* - è un approccio diffuso per rappresentare la combustione turbolenta premiscelata, tipica dei motori a ciclo Otto. L'idea alla base di questo modello è piuttosto semplice: la fiamma viene considerata come una superficie sottilissima che separa il gas fresco da quello bruciato, e la propagazione della fiamma avviene a una velocità influenzata dalle condizioni locali del flusso. Per descrivere l'avanzamento della combustione, il modello introduce una variabile detta variabile di progresso c , che vale 0 nel gas fresco e 1 nei gas combusti. Il comportamento della fiamma viene quindi rappresentato tramite l'evoluzione nel tempo e nello spazio di questa variabile.

A supporto di ciò, l'ECFM utilizza tre equazioni fondamentali:

- equazione per la variabile di progresso c , che governa la distribuzione del fronte di fiamma nel dominio:

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} c) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_c} \right) \nabla c \right] + \dot{\omega}_c$$

dove μ è la viscosità dinamica, μ_t la viscosità turbolenta e $\dot{\omega}_c$ rappresenta il tasso di produzione del combustibile bruciato.

- Equazione per la densità di superficie di fiamma Σ , che rappresenta quanto la fiamma è “deformata” dalla turbolenza:

$$\frac{\partial(\rho\Sigma)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \Sigma) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\Sigma} \right) \nabla \Sigma \right] + P_\Sigma - D_\Sigma$$

dove P_Σ è il termine di produzione di superficie di fiamma legato alla turbolenza e D_Σ è il termine dissipativo che tiene conto di fenomeni come la curvatura negativa della superficie o l'estinzione della fiamma stessa.

- Equazione per il combustibile fresco Y_u , che rappresenta l'evoluzione della quantità di combustibile non ancora bruciato:

$$\frac{\partial(\rho Y_u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} Y_u) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_u} \right) \nabla Y_u \right] - \dot{\omega}_u$$

con $\dot{\omega}_u$ che rappresenta il consumo di combustibile in funzione della velocità di fiamma e della superficie.

In sintesi, il modello ECFM consente di rappresentare con buona fedeltà il comportamento del fronte di fiamma anche in geometrie complesse, come nei motori con precamera o swirl elevato. È spesso utilizzato in ambito industriale proprio per la sua efficienza computazionale e compatibilità con modelli di turbolenza RANS o LES.

4.3 Il modello G-equation

Il modello G-equation rappresenta la combustione premiscelata come un processo di propagazione di una superficie immaginaria - il fronte di fiamma - che avanza nel dominio del fluido seguendo le caratteristiche turbolente locali. A tale scopo, si introduce una funzione scalare G , che rappresenta la distanza di ogni punto del dominio dal fronte di fiamma: nei gas freschi $G > 0$, nella zona della fiamma $G = 0$, nei gas combusti $G < 0$.

La fiamma viene così tracciata e fatta evolvere nel tempo attraverso una equazione di trasporto:

$$\frac{\partial(\rho G)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} G) = \rho s_t |\nabla G|$$

Il termine al secondo membro dell'equazione è un termine sorgente, descrive la propagazione del fronte di fiamma con velocità s_t , funzione delle condizioni turbolente locali. Già da questa prima equazione si può notare una differenza netta rispetto al modello ECFM: la velocità turbolenta di combustione s_t qui è un input del modello; quest'ultima però non può essere nota a priori, motivo per il quale serve una correlazione empirica che ne approssimi il suo valore.

Per rappresentare l'effetto della turbolenza sulla struttura e sulla dispersione del fronte, si introduce anche una seconda equazione per la varianza della distanza dalla fiamma, indicata come G' :

$$\frac{\partial(\rho G')}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} G') - \rho s_t \frac{\nabla G' \cdot \nabla G}{|\nabla G|} = 2\mu_t \left(\frac{\partial G}{\partial x_j} \right)^2 - c_s \rho \frac{\varepsilon}{k} G'$$

Il termine curvatura $\rho s_t \frac{\nabla G' \cdot \nabla G}{|\nabla G|}$ rappresenta l'influenza della curvatura del fronte di fiamma, che può localmente accelerare o rallentare la propagazione.

Il termine di produzione turbolenta $2\mu_t \left(\frac{\partial G}{\partial x_j} \right)^2$ descrive il contributo della turbolenza al corrugamento del fronte.

Il termine dissipativo $c_s \rho \frac{\varepsilon}{k} G'$ rappresenta la dissipazione del corrugamento dovuta alla viscosità turbolenta.

Questa formulazione permette di rappresentare in maniera robusta l'interazione tra flusso e combustione, anche in presenza di camere complesse o moti fortemente instazionari.

Nel presente elaborato, si è scelto di utilizzare questo modello di combustione per la fase di simulazione e di confrontarlo con i dati sperimentali del motore RCEM e con i risultati di simulazioni eseguite con modello ECFM sullo stesso motore.

Correlazione di Peters

Per la stima della velocità di fiamma turbolenta, è stata utilizzata nel presente lavoro la correlazione di Peters, che consente di descrivere la transizione da fiamma laminare a turbolenta come funzione del numero di Damköhler:

$$s_t = s_l + u' \left\{ -\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da + \left[\left(\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da \right)^2 + a_4 b_3^2 Da \right]^{1/2} \right\}$$

dove s_l è la velocità di fiamma laminare, u' è l'intensità turbolenta del flusso, Da è il numero di Damköhler e a_4 , b_3 , b_1 sono costanti empiriche.

Questa relazione, a differenza di quelle più semplici, non satura artificialmente il valore di s_t a elevata turbolenza, ed è in grado di riprodurre accuratamente il comportamento osservato sperimentalmente nei motori ad accensione comandata con flussi stratificati e irregolari.

Attraverso la correlazione di Peters, l'input del modello ricade a cascata sulla velocità laminare di combustione s_l , che a sua volta può essere estrapolata da correlazioni empiriche in funzione delle proprietà fisiche del sistema (solitamente si calcola s_l in funzione di pressione, temperatura e frazione di EGR in ciascun punto del dominio), oppure si possono ricavare valori tabulati di s_l per diverse combinazioni di valori di pressione, temperatura e frazione in massa di combustibile da meccanismi di cinetica delle reazioni coinvolte nel fronte di fiamma. In questo lavoro di tesi si è seguita quest'ultima strada, come si spiegherà in dettaglio nel capitolo successivo.

Modello di accensione

Nelle simulazioni CFD dei motori a combustione interna, la fase di accensione della fiamma rappresenta uno dei processi più complessi da modellare con precisione, sia per ragioni fisiche che numeriche. In un motore reale, l'accensione avviene mediante una scarica elettrica tra gli elettrodi della candela, che ionizza l'aria locale e forma un plasma a temperature che superano i 3000 K. Questo plasma innesca una reazione chimica molto rapida che genera un kernel di fiamma sferico, inizialmente laminare e di dimensioni sub-millimetriche, il quale si espande e interagisce progressivamente con la turbolenza circostante. Riprodurre numericamente questo meccanismo richiederebbe griglie estremamente fini (nell'ordine dei micron), modelli di scarica elettrica, e una chimica dettagliata ad alta fedeltà, con tempi caratteristici molto brevi (nanosecondi o microsecondi). Di conseguenza, tale approccio risulterebbe non solo oneroso in termini computazionali, ma anche instabile e poco praticabile nel contesto di simulazioni transitorie su scala ciclo-motore.

Per questo motivo, nelle simulazioni CFD effettuate in questo lavoro con il modello G-equation, si è adottato un approccio semplificato all'accensione, basato sull'inizializzazione diretta dello scalare G . Al momento dell'accensione, viene definita una piccola regione attorno alla posizione della candela in cui il campo G viene posto pari a zero, corrispondente alla posizione iniziale del fronte di fiamma. Questo metodo consente di avviare il processo di combustione senza dover modellare esplicitamente il kernel iniziale, né considerare parametri empirici come l'efficienza di rilascio termico, la dimensione iniziale del kernel, o il ritardo d'ignizione. L'evoluzione successiva del fronte di fiamma è quindi governata direttamente dall'equazione di trasporto del campo G , che ne determina la propagazione sotto l'influenza del campo di velocità e della turbolenza locale. Si tratta di una strategia ampiamente adottata nella pratica CFD, in quanto garantisce un compromesso efficace tra realismo fisico e stabilità numerica, preservando la coerenza del processo combustivo all'interno della camera.

4.4 I modelli SAGE e CEQ

Nell'ambito della simulazione CFD dei processi di combustione, la risoluzione dei meccanismi di reazione chimica può avvenire a livelli di dettaglio diversi, a seconda degli obiettivi delle simulazioni stesse e delle risorse computazionali a disposizione. I due modelli chimici più impiegati nei principali software CFD, come Converge, sono il modello SAGE e il modello CEQ.

Il modello SAGE è un solutore chimico che esegue elaborati meccanismi cinetici risolvendo esplicitamente le equazioni di bilancio per ciascuna delle specie coinvolte nella combustione. Ciò significa che per ogni reazione chimica coinvolta nel meccanismo (che può comprendere centinaia di reazioni e decine di specie), il modello SAGE calcola la variazione di concentrazione in funzione del tempo e delle condizioni locali (temperatura, pressione, composizione) con precisione ma anche con costi computazionali elevati, specialmente nel caso di mesh raffinate e molte zone di reazione.

Il modello *Chemical Equilibrium* (CEQ), propone un approccio più elementare ma altrettanto proficuo, presupponendo che i sottoprodotti del processo combustivo raggiungano l'equilibrio termodinamico pressoché istantaneamente. In particolare, la progressione temporale delle reazioni non viene qui riprodotta in dettaglio; invece, la composizione finale dei prodotti della combustione viene computata sulla base della temperatura, della pressione e dell'equilibrio in massa tra le specie implicate. Tale prospettiva risulta particolarmente opportuna laddove non occorra risolvere la chimica transitoria o la scala temporale delle reazioni chimiche sia di gran lunga inferiore di quella dei fenomeni di trasporto fluidodinamico, interessandosi unicamente all'evoluzione macroscopica del fronte di fiamma, della distribuzione termica e della dinamica dei flussi. Il modello CEQ non fornisce dati sulle specie intermedie e non è idoneo alle simulazioni che richiedono una previsione puntuale delle concentrazioni di ossidi d'azoto, monossido di carbonio, idrocarburi incombusti o particolato. Ciò nondimeno, è sostanzialmente meno dispendioso del modello SAGE e può essere impiegato con profitto negli studi di ottimizzazione e convalida dei modelli combustivi.

Il presente lavoro di tesi riguarda la simulazione numerica della combustione in un motore RCEM utilizzando il modello G-equation per descrivere la propagazione del fronte di fiamma. Il modello CEQ è stato scelto come solutore chimico per la zona dei gas combusti e dello stesso fronte di fiamma. Questa scelta è motivata dal fatto che l'obiettivo del lavoro non è l'analisi delle emissioni o di reazioni complesse, ma piuttosto la calibrazione del processo di combustione rispetto al comportamento effettivo del motore. Inoltre, l'utilizzo del modello CEQ ha permesso una notevole riduzione dei tempi di simulazione, consentendo numerose iterazioni parametriche sulle condizioni operative e sulle miscele aria-combustibile. Questa strategia si è dimostrata particolarmente efficace nel contesto di uno studio esplorativo su un motore sperimentale, dove la corretta rappresentazione delle dinamiche di combustione piuttosto che la previsione precisa della composizione dei gas di scarico erano la priorità principale.

5 Meccanismi di cinetica chimica

Nello studio della combustione premiscelata nei motori a combustione interna, in particolare quelli ad accensione comandata (SI), comprendere e prevedere la velocità della fiamma laminare (LBV) è di fondamentale importanza. Questo parametro, definito in coordinate solidali al fronte di fiamma come la velocità, relativa e normale al fronte di fiamma stesso, con la quale la miscela di gas freschi va incontro alla fiamma e si trasforma nei prodotti di combustione in condizioni di flusso laminare, è un input fondamentale per molti modelli di combustione, tra cui i modelli flamelet ECFM e G-equation trattati in questo elaborato.

La velocità di fiamma laminare s_L dipende da diversi fattori termodinamici, tra cui il rapporto di equivalenza combustibile-aria, la temperatura, la pressione e la composizione del combustibile. Prevedere con precisione s_L è fondamentale perché influenza direttamente la velocità di propagazione della fiamma, i tempi di rilascio termico e, in ultima analisi, l'evoluzione della pressione all'interno del cilindro del motore.

Nelle simulazioni CFD, la velocità della fiamma laminare non viene risolta direttamente dalle reazioni chimiche a causa dei vincoli computazionali. Viene invece precalcolata attraverso simulazioni di fiamma monodimensionali utilizzando meccanismi chimici dettagliati o semplificati e quindi fornita come input tabulato al modello di combustione. Il calcolo comporta la risoluzione delle equazioni di conservazione stazionarie per la massa, le specie e l'energia in configurazione di fiamma premiscelata a propagazione libera. La soluzione produce la struttura della fiamma, la temperatura e i profili delle specie, da cui viene estratta la velocità di propagazione.

Queste simulazioni vengono generalmente eseguite utilizzando software specifici o tramite tool implementati direttamente sui software di CFD tridimensionale, come nel caso di Converge, e si basano su meccanismi cinetici dettagliati e convalidati (ad esempio, GRI-Mech 3.0, C3). Le velocità di fiamma calcolate vengono quindi utilizzate nei modelli di combustione turbolenta per stimare la velocità della fiamma turbolenta s_T , che riflette la velocità di propagazione della fiamma in un ambiente turbolento come quello di un cilindro di motore.

Per valutare se una fiamma rimane nel regime *flamelet*, dove i modelli di combustione presi in questa analisi sono validi, viene utilizzato il diagramma di Borghi-Peters. Questo diagramma, come spiegato nella sezione 4.1, classifica le fiamme premiscelate turbolente sulla base dei numeri adimensionali Ka e Da . Con l'aumentare dell'intensità della turbolenza (valori più elevati di u'), la fiamma può entrare nella *thin reaction zone* o persino nel *distributed reaction regime*, dove la struttura della fiamma viene alterata dalla turbolenza. In questi regimi, l'ipotesi di un fronte di fiamma sottile viene meno, richiedendo strategie di modellizzazione più complesse o persino la risoluzione diretta dei termini di origine chimica.

Per applicazioni motoristiche, il processo di combustione opera solitamente all'interno o in prossimità del regime *flamelet*, in particolare nelle combustioni a carica stratificata o magra. Per questo motivo, la combinazione di velocità di fiamma laminari precalcolate con modelli di tipo *level-set* (G-equation) o di densità superficiale della fiamma (ECFM) fornisce un quadro robusto ed efficiente dal punto di vista computazionale per la modellizzazione della combustione SI.

5.1 Gri-Mech 3.0

GRI-Mech 3.0 rappresenta uno dei meccanismi cinetici chimici più ampiamente utilizzati per la simulazione della combustione di metano e gas naturale. Formulato presso l'Università della California, Berkeley, il suo obiettivo principale è quello di fornire un insieme completo e affidabile di reazioni in grado di riprodurre il comportamento reale delle fiamme premiscelate e non premiscelate in un ampio range di condizioni operative. Questo meccanismo è il risultato di anni di progressi e validazioni reiterate e si basa sulla versione precedente, GRI-Mech 2.11, con aggiornamenti sostanziali sia alla cinetica chimica che al database termodinamico.

Una delle implementazioni più significative presentate in GRI-Mech 3.0 è l'espansione della sua applicabilità alla combustione del solo metano: il meccanismo ora incorpora percorsi di reazione dettagliati per altri idrocarburi leggeri, in particolare etano, propano e le loro specie intermedie. Ciò rende GRI-Mech 3.0 uno strumento utile non solo per l'analisi della combustione di metano puro, ma anche per applicazioni che coinvolgono miscele di gas naturale, combustibili arricchiti di idrogeno e persino flussi di idrocarburi diluiti. Queste caratteristiche sono particolarmente pertinenti nel contesto dei moderni sistemi energetici, dove la flessibilità dei combustibili e il controllo delle emissioni sono questioni sempre più critiche.

Il meccanismo comprende un totale di 325 reazioni elementari che coinvolgono 53 specie chimiche, coprendo i percorsi essenziali di ossidazione e riduzione per la chimica del carbonio, dell'idrogeno e dell'azoto. Ciascuna di queste reazioni è stata selezionata e parametrizzata sulla base dei dati sperimentali disponibili e delle valutazioni teoriche. È stato compiuto uno sforzo significativo per garantire che il meccanismo preveda con precisione le proprietà chiave della combustione, quali la velocità di fiamma laminare, i tempi di ritardo di accensione e i profili di concentrazione delle specie nelle fiamme laminari premiscelate. Particolare attenzione è stata dedicata alla modellizzazione della formaldeide (CH_2O), un intermedio chiave nell'ossidazione degli idrocarburi, rivedendo i coefficienti di velocità delle reazioni che coinvolgono specie come HO_2 , HCO e O_2 .

Per raggiungere questo livello di precisione, GRI-Mech 3.0 è stato sottoposto a un processo di affinamento rigoroso e meccanizzato, con l'obiettivo di ridurre la discrepanza tra i risultati ricreati e le misurazioni analitiche, utilizzando un algoritmo di aggiustamento dei minimi quadrati non lineare. Nel processo di ottimizzazione, un sottoinsieme selezionato di grandezze cinetiche (essenzialmente fattori pre-esponenziali ed energie di attivazione) è stato modificato ripetutamente per migliorare la concordanza con i set di dati di riferimento, quali la velocità di combustione per diversi rapporti di equivalenza, la rilevazione di concentrazioni di specie in bruciatori a fiamma stabile, ritardi di accensione da prove con tubi di shock e proprietà termodinamiche come capacità termiche ed entalpie di formazione.

L'ottimizzazione è stata completata secondo i seguenti passaggi:

- inizialmente, è stata condotta un'analisi di sensibilità per riconoscere quali reazioni avevano l'influenza più significativa su ciascun target osservabile;
- sono state adottate funzioni correttive per evitare modifiche fisicamente irrealistiche dei coefficienti di velocità;
- sono stati applicati vincoli fisici per mantenere i parametri regolati entro limiti chimici ragionevoli.

In generale, sono state ottimizzate circa 50 costanti di velocità di reazione, mentre i parametri rimanenti sono stati ereditati da fonti consolidate o da forme precedentemente approvate. Il risultato

è un sistema che non solo ricrea un'ampia gamma di risultati analitici con una precisione migliorata, ma mantiene anche la robustezza strutturale e la coerenza fisica previste per una visualizzazione della combustione ad alta fedeltà.

Le applicazioni del GRI-Mech 3.0 spaziano dagli studi base sul comportamento di fiamma alle complesse simulazioni CFD di combustione su motori a combustione interna, turbine a gas e bruciatori industriali. Grazie al suo equilibrio tra natura multiforme e accuratezza, viene regolarmente utilizzato in combinazione con modelli di fiamma semplificati.

In sintesi, GRI-Mech 3.0 fornisce un set di reazioni chimiche ottimizzate, accurate e rigorosamente validate, che lo rendono particolarmente adatto alla simulazione di sistemi di combustione di miscele a base metano. La sua architettura ne facilita l'utilizzo sia come base cinetica elaborata sia come benchmark per la calibrazione di meccanismi ridotti o scheletrici. Per questi motivi, continua ad essere ampiamente utilizzato nella ricerca accademica e nelle applicazioni industriali che richiedono modelli di combustione affidabili.

5.2 C3 v3.5

Il meccanismo chimico C3 (ad oggi giunto alla versione v3.5), creato dal Computational Chemistry Consortium, è un modello cinetico estremamente dettagliato ideato per simulare il comportamento di combustione di un'ampia varietà di idrocarburi, inclusi i combustibili surrogati complessi. Include i più recenti sotto-meccanismi per i percorsi di ossidazione a bassa e alta temperatura, la formazione di ossidi di azoto (NO_x) e la chimica degli idrocarburi policiclici aromatici (PAH), tutti basati su una chimica di base condivisa (NUIGMech1.1). Questa base unificata è stata adottata da tutti gli organismi che hanno contribuito al progetto per garantire la coerenza chimica e la fusione perfetta dei diversi sotto-meccanismi.

L'obiettivo fondamentale del meccanismo C3, come per il GRI-Mech, è quello di consentire previsioni accurate dei parametri chiave della combustione, ad esempio i tempi di ritardo di accensione, le velocità di combustione laminare, le strutture di fiamma e la formazione di inquinanti (particolato e ossidi di azoto). La sua composizione è modulare e adattabile, consentendo agli utenti di estrarre e ridurre il meccanismo per soddisfare specifiche esigenze di simulazione. Ciò è particolarmente vantaggioso nelle applicazioni CFD, dove la dimensione computazionale del modello completo può essere proibitiva.

C3 trova ampia applicazione nella modellizzazione di combustibili surrogati sia single-fuel che multi-fuel, come ad esempio:

- Miscele di gas naturale integrate con n-alcani (C2-C7), utilizzate per calibrare la reattività di accensione.
- Combustibili di riferimento primari (PRF), composti da n-eptano e iso-ottano, comunemente utilizzati per simulare il numero di ottani della benzina.
- Combustibili di riferimento primari al toluene (TPRF), che includono toluene per catturare la sensibilità all'ottano.
- Combustibili surrogati diesel basati su catene di n-alcani più lunghe (C8-C12).
- Miscele benzina-alcoli e diesel-biocarburante.
- Combustibili pertinenti alle strategie di combustione a bassa temperatura.

L'approccio di modellazione è stato rigorosamente convalidato rispetto a una vasta gamma di informazioni sperimentali, tra cui i tempi di ritardo di accensione in tubi di shock e macchine a compressione rapida, le velocità di fiamma laminare quantificate tramite bruciatori a flusso di calore e i profili delle specie provenienti da reattori a getto (JSR) e reattori a flusso. È degno di nota il fatto che dimostri una forte congruenza con i dati relativi ai combustibili di riferimento primari PRF e TPRF in un'ampia gamma di pressioni (fino a 40 bar), rapporti di equivalenza (da estremamente magri a ricchi) e temperature iniziali.

Per calcolare le velocità di fiamma laminare, una proprietà fondamentale sia per la validazione empirica che per la messa a punto dei parametri del modello, C3 adotta una strategia a due fasi:

- 1) Inizialmente viene eseguita un'operazione di filtraggio incentrata sulle specie per isolare esclusivamente i componenti del combustibile rilevanti (ad esempio, iso-ottano e toluene per un TPRF), riducendo così in modo sostanziale il numero di specie e reazioni. Ciò rende il meccanismo più gestibile per simulazioni zero e unidimensionali.

- 2) Successivamente, utilizzando strumenti come DRGEPSA (Directed Relation Graph with Error Propagation and Sensitivity Analysis), il meccanismo estratto viene ulteriormente semplificato per mantenere le quantità target (ad esempio, LBV o IDT) entro un margine di errore specificato. Le LBV vengono quindi calcolate simulando fiamme premiscelate a propagazione libera 1D a diversi rapporti di equivalenza, pressioni e temperature. La velocità della fiamma si ottiene risolvendo la struttura della fiamma e identificando la velocità di propagazione allo stato stazionario.

Questi passaggi sono computazionalmente onerosi quando si utilizza il meccanismo completo, che può contenere oltre 16.000 reazioni e quasi 4.000 specie. L'utilizzo di procedure di estrazione e riduzione consente un notevole risparmio di tempo.

Il meccanismo C3 fornisce una base collaudata e versatile per la concettualizzazione della combustione ad alta precisione su una vasta gamma di combustibili. La sua capacità di imitare con estrema precisione le velocità di combustione laminare e i ritardi di accensione, pur riducendo il meccanismo completo delle reazioni, lo rende particolarmente adatto sia per la ricerca che per gli utilizzi in applicazioni CFD.

6 Risultati numerici

Tutti i risultati numerici presentati in questa sezione sono stati confrontati coi rispettivi risultati sperimentali e con i risultati numerici di due simulazioni eseguite con modello di combustione ECFM che differiscono tra loro per il meccanismo di cinetica chimica: uno utilizza il meccanismo C3, l'altro il Gri-Mech.

Per ogni caso sono stati riportati su foglio di calcolo Excel i valori tabulati di pressione in camera di combustione e precamera, volume e rapporto dei calori specifici γ in funzione dei gradi di angolo di manovella dopo il punto morto superiore (CAD AFTDC – Crank Angle Degrees After Firing Top Dead Centre).

Sostituendo e riformulando in termini di grandezze fisiche misurabili (p , T , γ) il primo principio della termodinamica per sistemi chiusi ($dQ = dU + pdV$) si arriva a una stima indiretta del rilascio termico effettivo in camera di combustione, meglio noto in ambito motoristico come *Apparent Heat Release Rate* (AHRR), dato dalla seguente formulazione:

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p(t) \frac{dV}{dt} + \frac{1}{\gamma - 1} V(t) \frac{dp}{dt}$$

dove $\frac{dQ}{dt}$ è l'AHRR espresso in Watt [J/s], $p(t)$ e $V(t)$ sono rispettivamente la pressione e il volume della camera di combustione in un dato istante temporale e infine γ il rapporto dei calori specifici $\frac{c_p}{c_v}$. Integrando nel tempo l'andamento dell'AHRR si ottiene così il rilascio termico cumulato (CHR):

$$CHR(t) = \int_{t_0}^t AHRR(\tau) d\tau$$

Infine, per avere una stima della frazione di massa bruciata (MFB) in funzione dell'angolo di manovella partendo dal CHR la formulazione è la seguente:

$$MFB(\theta) = \frac{CHR(\theta)}{CHR_{max}}$$

Per ottenere una validazione numerico sperimentale coerente, è stato usato questo approccio analitico sia per i casi sperimentali che per quelli simulati. Una volta riportati caso per caso gli andamenti di pressione in camera e precamera, AHRR e MFB in funzione dell'angolo di manovella θ , qualora i risultati numerici divergessero da quelli sperimentali è necessaria una ricalibrazione del modello G-equation. Come anticipato nella sezione 4.3, la velocità di fiamma turbolenta è l'input del modello e può essere stimata mediante opportune correlazioni; in questo caso specifico si è deciso di procedere con la modellazione mediante correlazione di Peters:

$$s_t = s_l + u' \left\{ -\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da + \left[\left(\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da \right)^2 + a_4 b_3^2 Da \right]^{1/2} \right\}$$

Dato che la velocità di fiamma laminare s_l è determinata dal meccanismo cinetico C3 v3.5, l'intensità di turbolenza u' e il numero di Damköhler Da sono determinati dal modello di turbolenza k-ε RNG, per esclusione i parametri soggetti a calibrazione sono a_4 , b_3 e b_1 ; in particolare il parametro b_3 , comparando in ogni termine della correlazione con dipendenza quadratica, è sicuramente il coefficiente che ha il maggior impatto sulla variazione di s_t , motivo per cui si andrà a calibrare esclusivamente quest'ultimo termine.

Di seguito si riportano i risultati ottenuti caso per caso col miglior compromesso di calibrazione tra parametro b_3 e anticipo di accensione SA.

Caso HR 0.25 $\Phi=1$

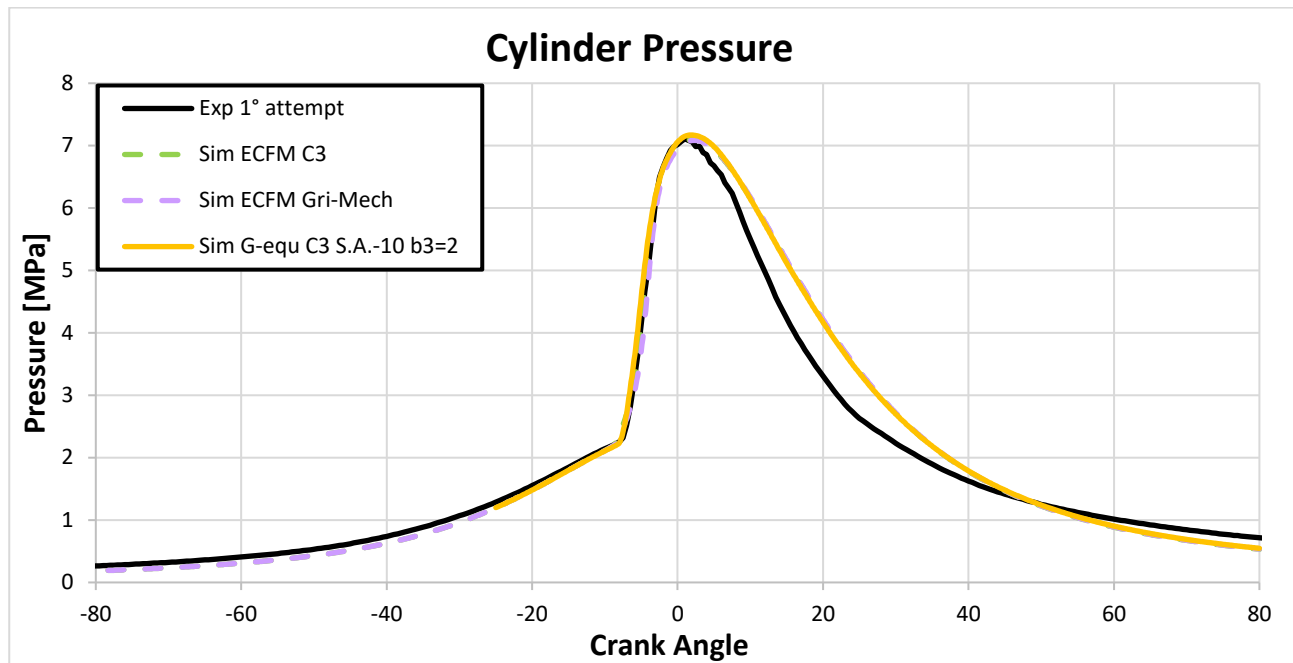


Figura 6: pressione in camera-caso HR 0.25 stechiometrico

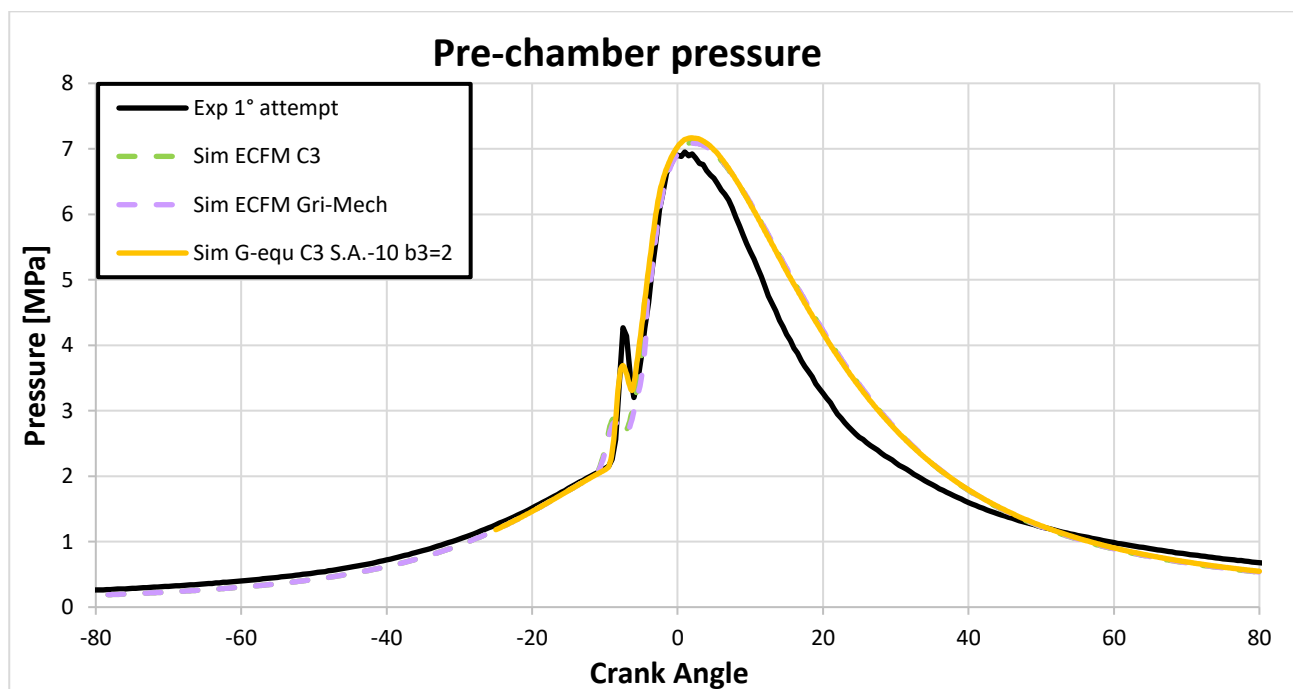


Figura 7: pressione in precamera-caso HR 0.25 stechiometrico

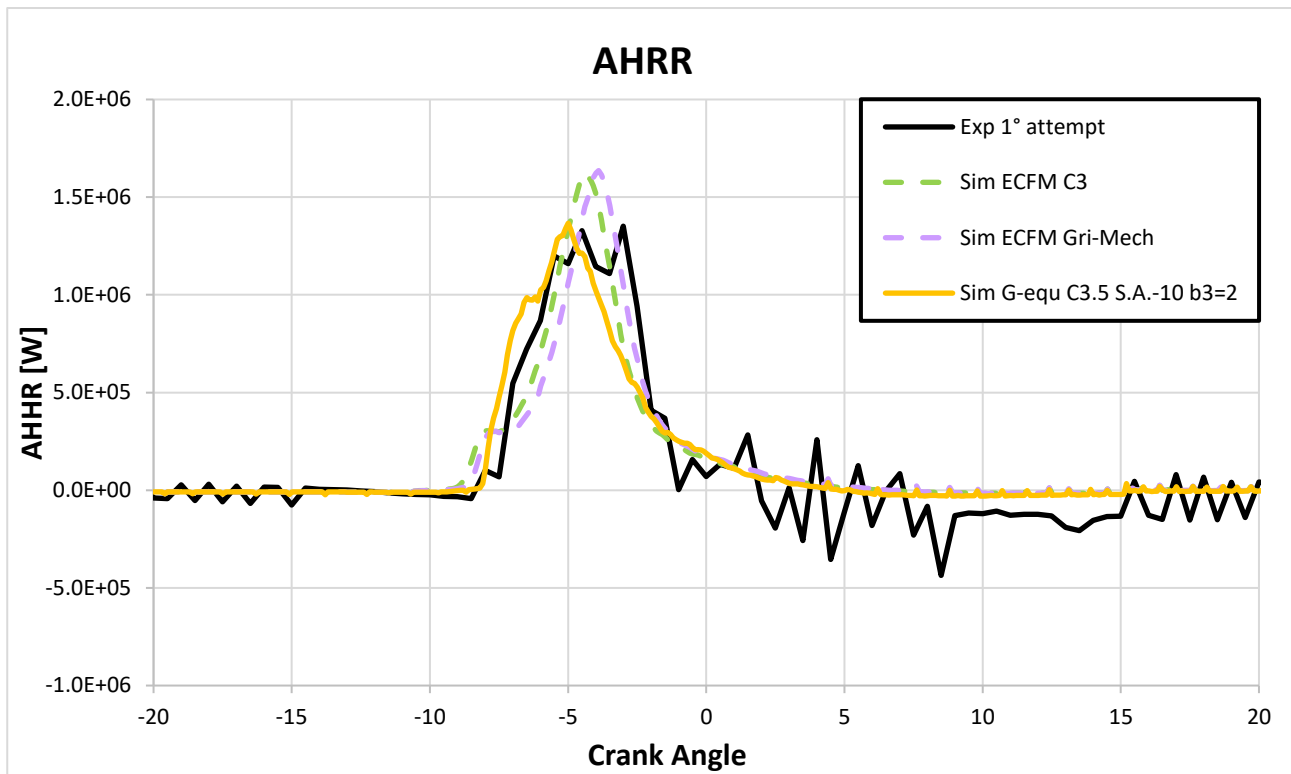


Figura 8: rilascio termico-caso HR 0.25 stechiometrico

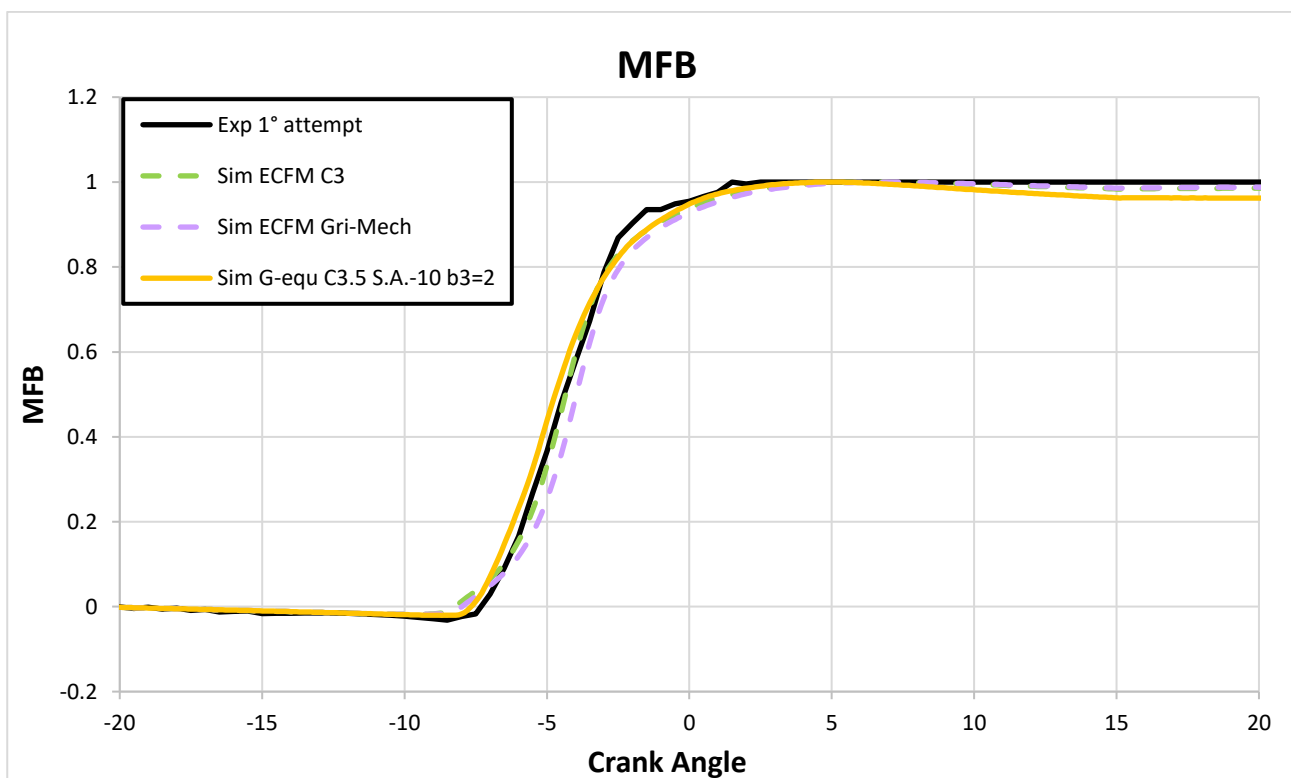


Figura 9: frazione di massa bruciata-caso HR 0.25 stechiometrico

Caso HR 0.25 $\Phi=0.625$

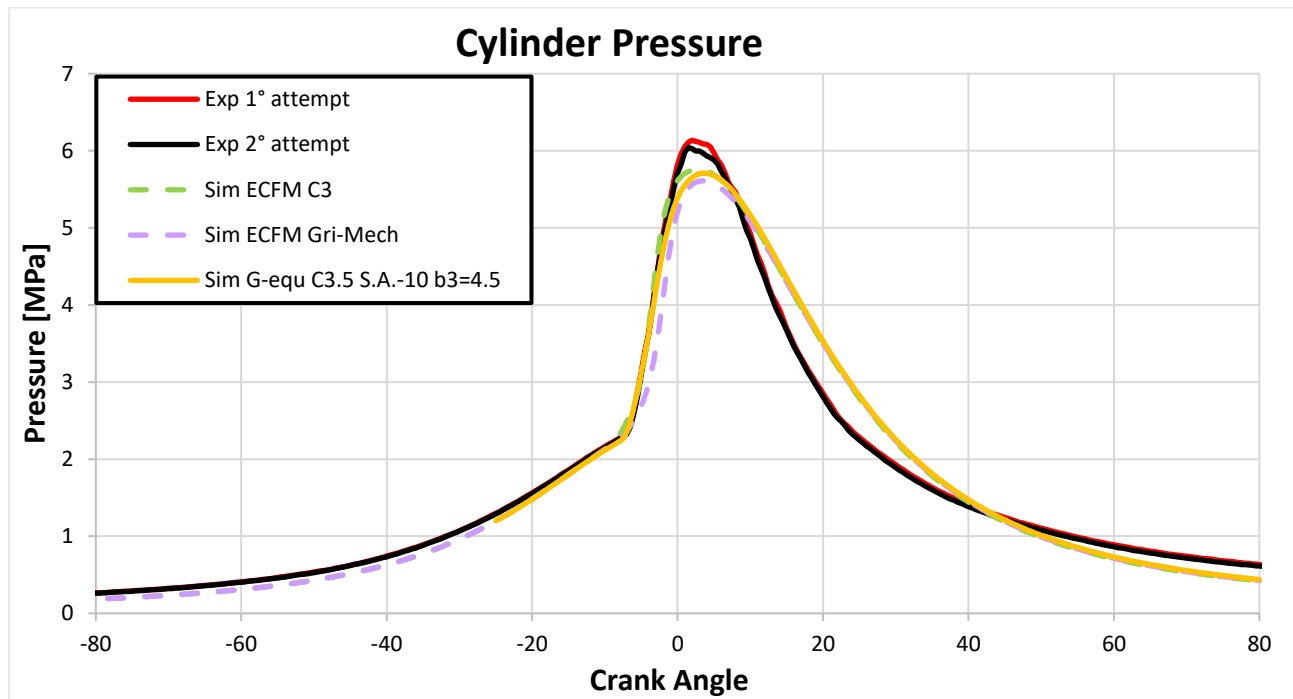


Figura 10: pressione in camera-caso HR 0.25 magro

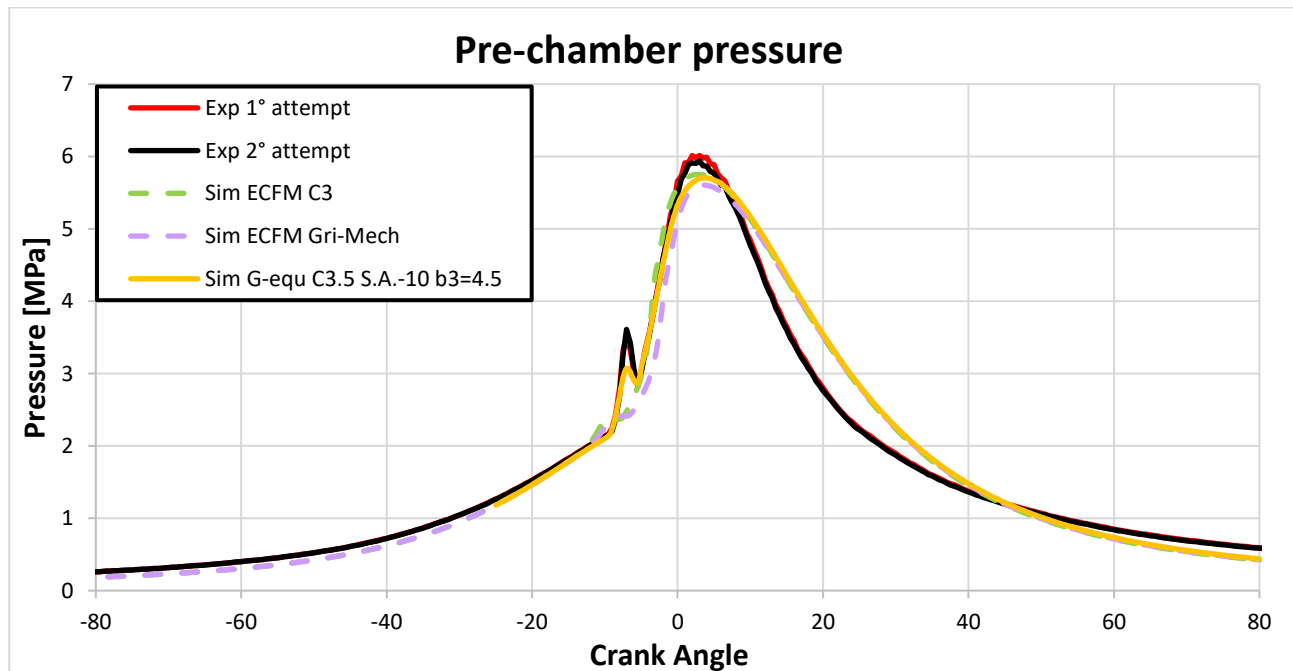


Figura 11: pressione in precamera-caso HR 0.25 magro

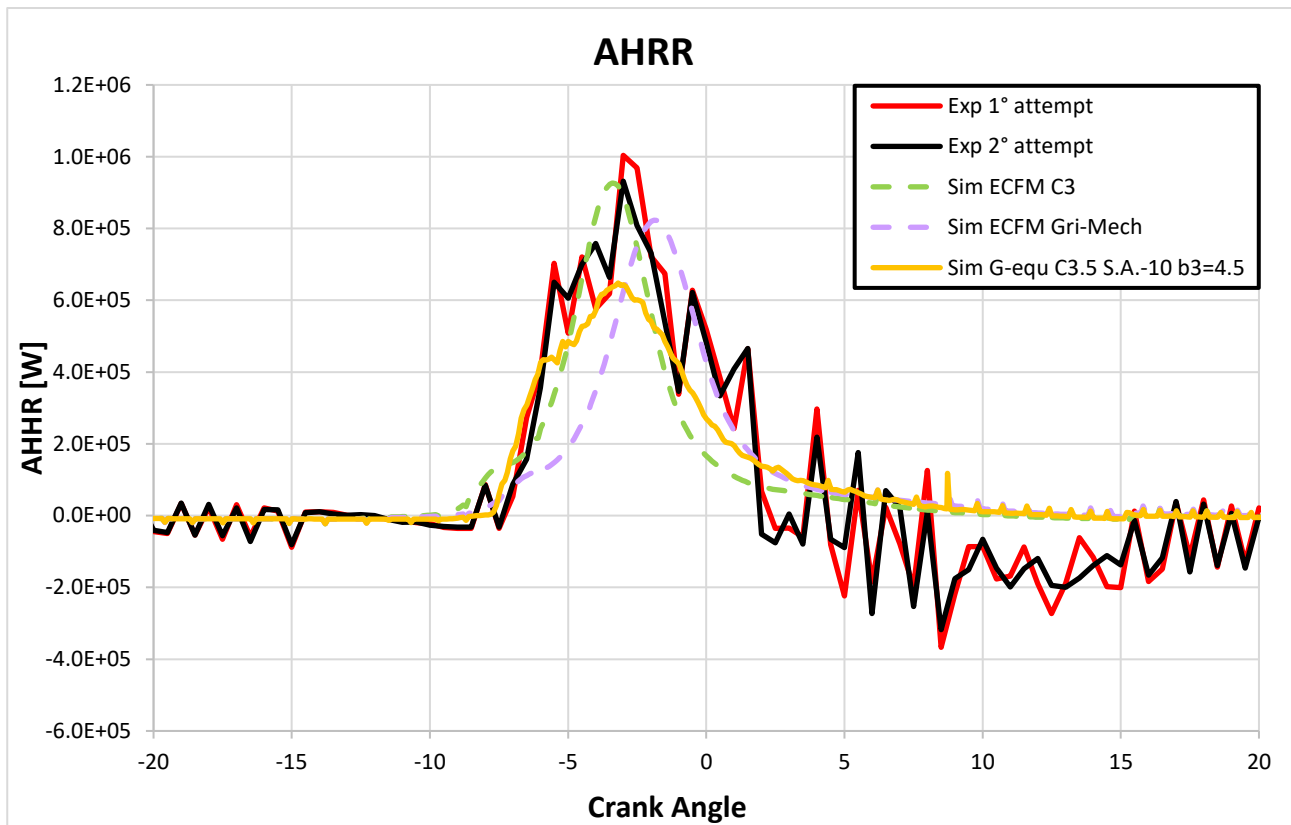


Figura 12: rilascio termico-caso HR 0.25 magro

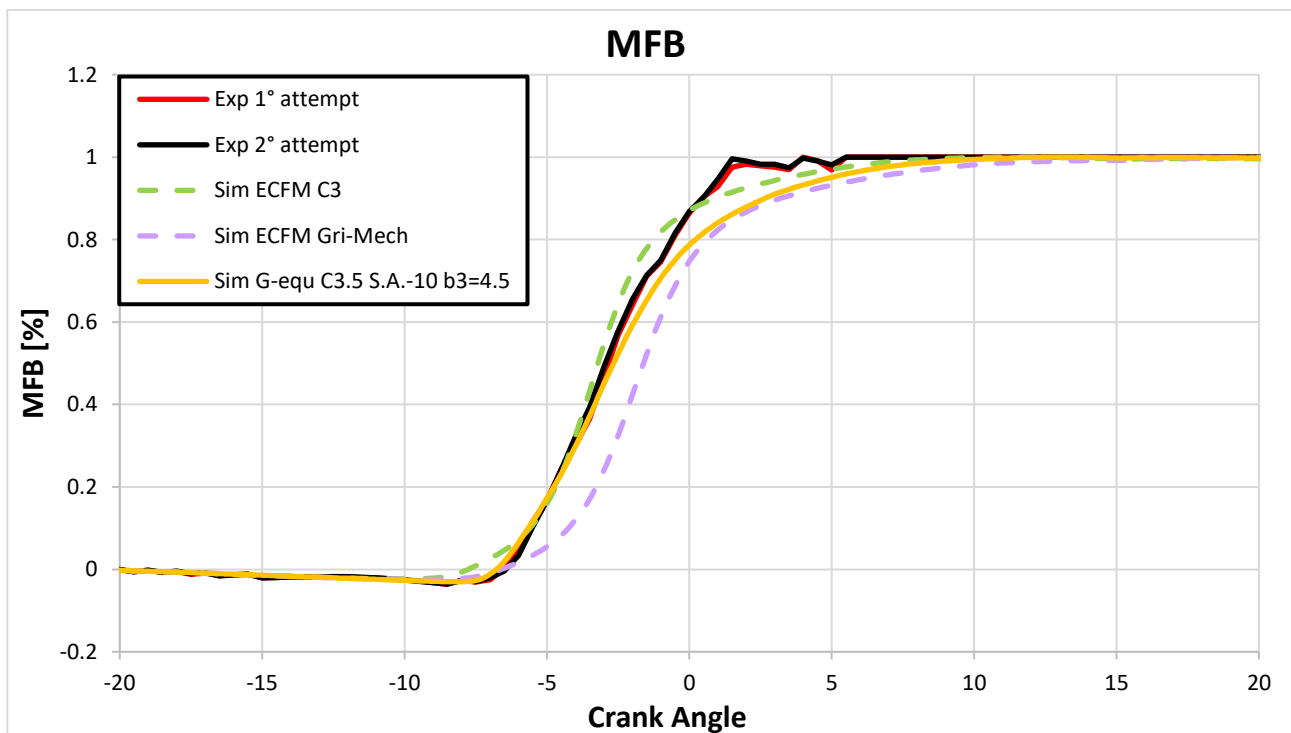


Figura 13: frazione di massa bruciata-caso HR 0.25 magro

Caso HR 0.5 $\Phi=1$

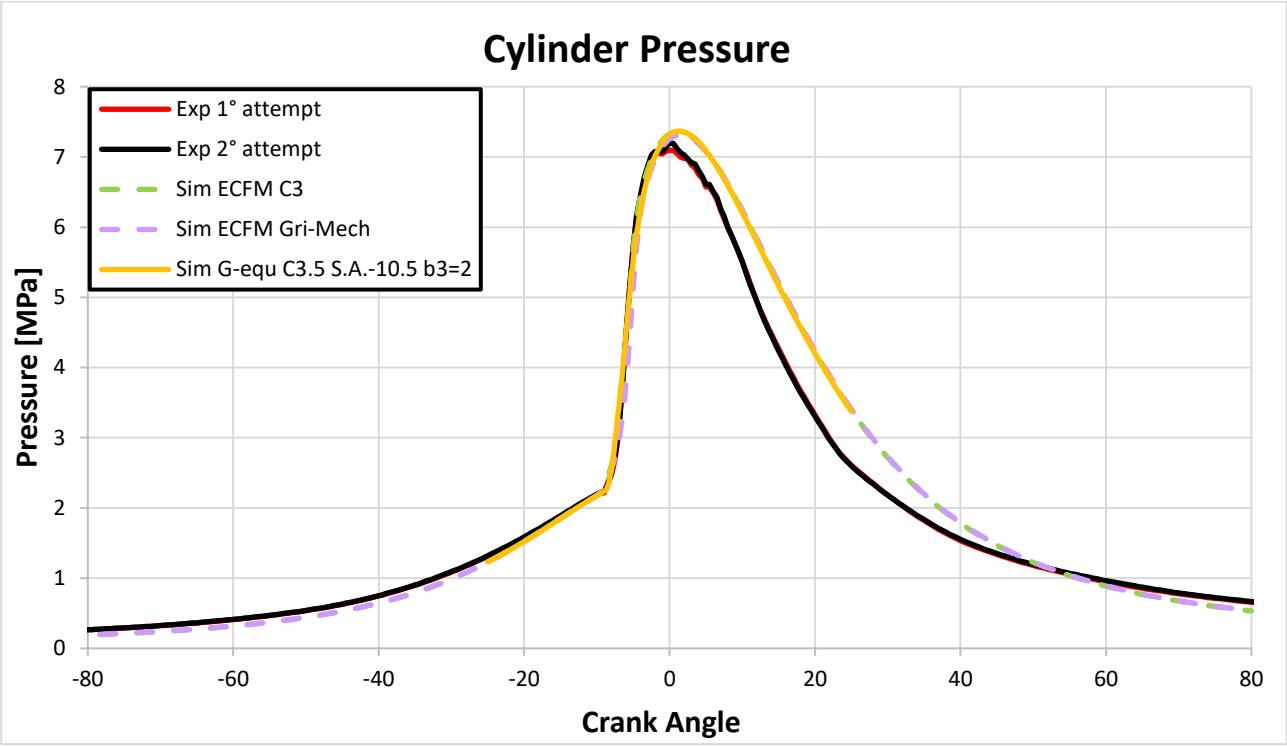


Figura 14: pressione in camera-caso HR 0.5 stechiometrico

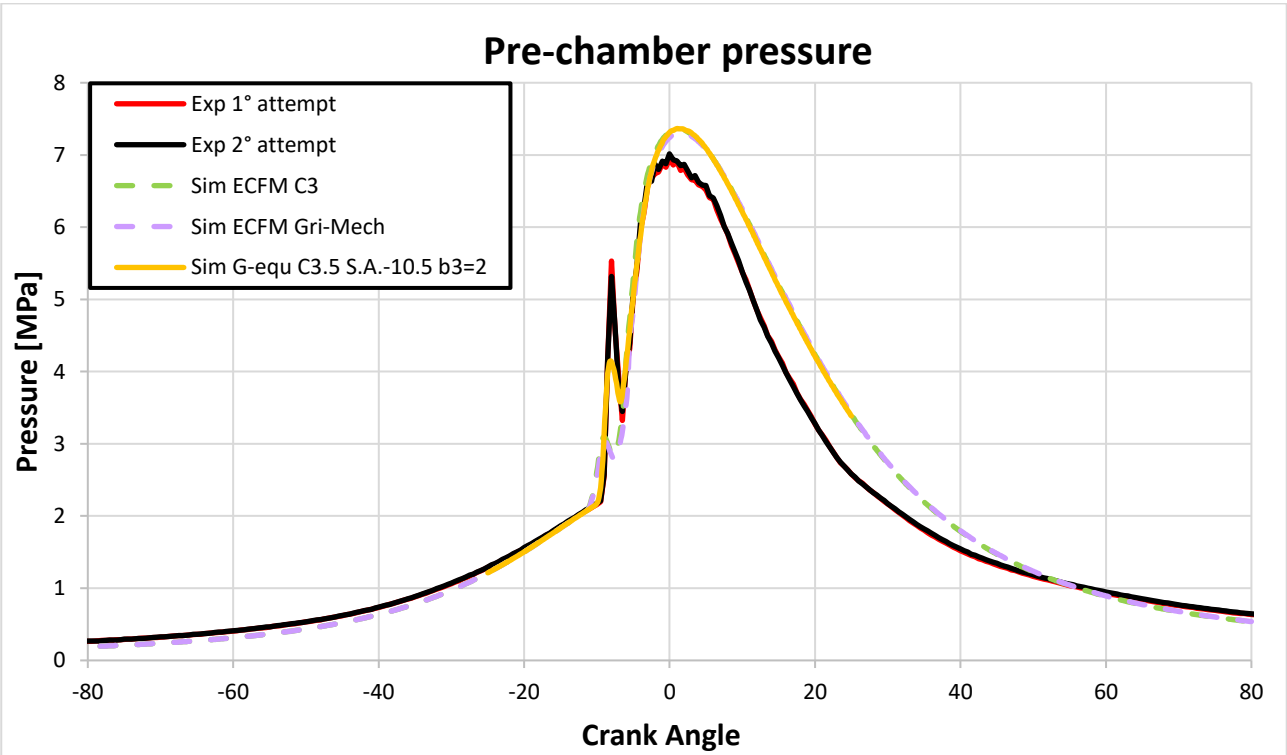


Figura 15: pressione in precamera-caso HR 0.5 stechiometrico

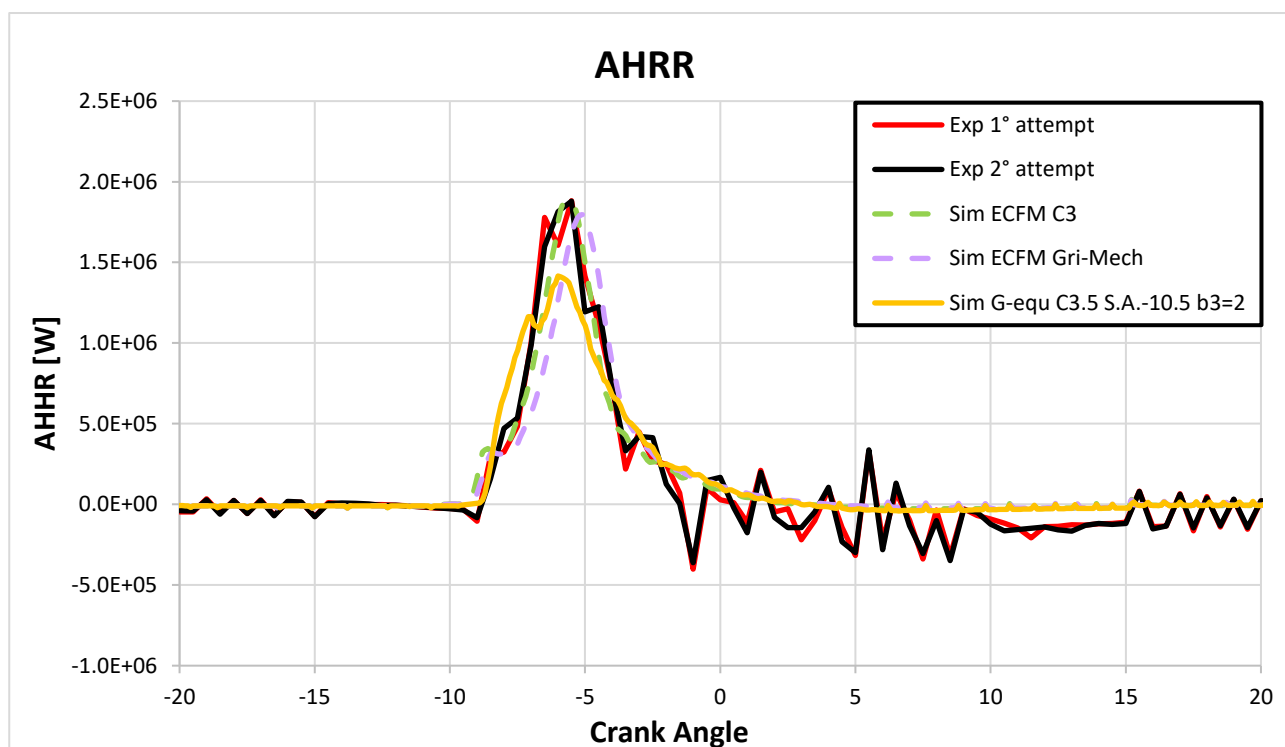


Figura 16: rilascio termico-caso HR 0.5 stechiometrico

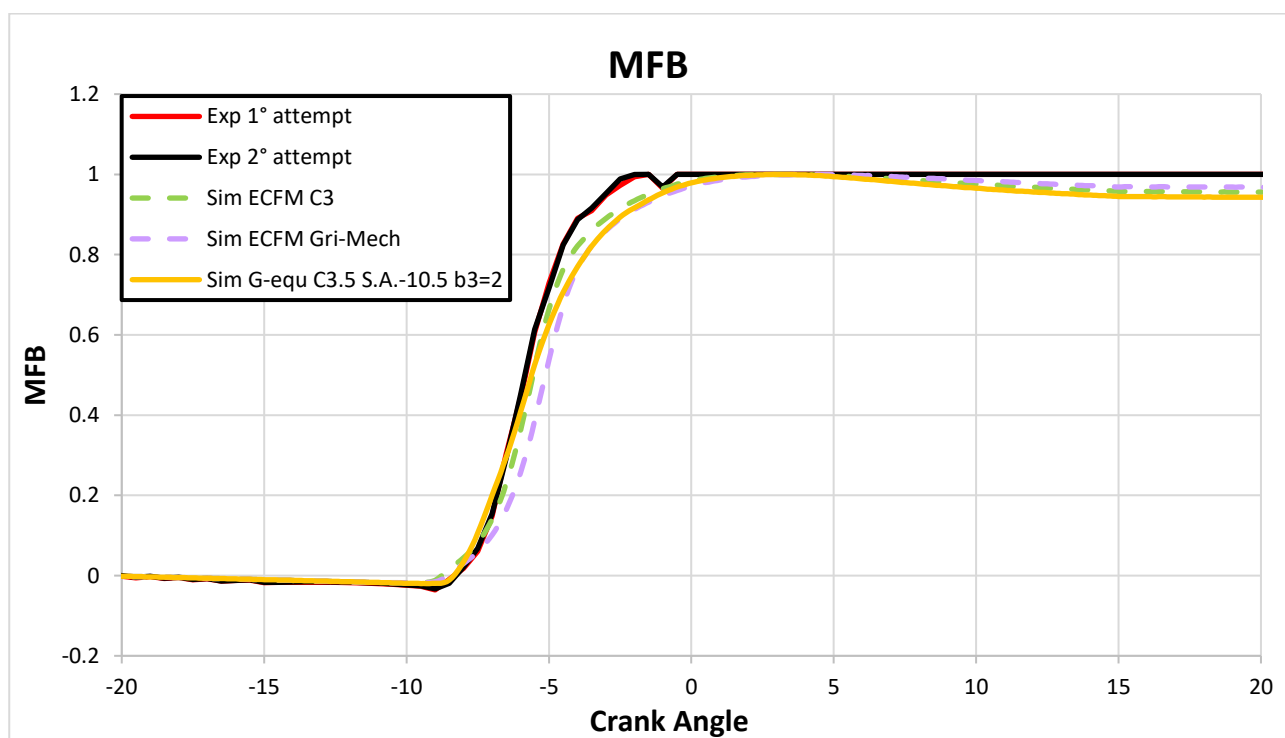


Figura 17: frazione di massa bruciata-caso HR 0.5 stechiometrico

Caso HR 0.5 $\Phi=0.625$

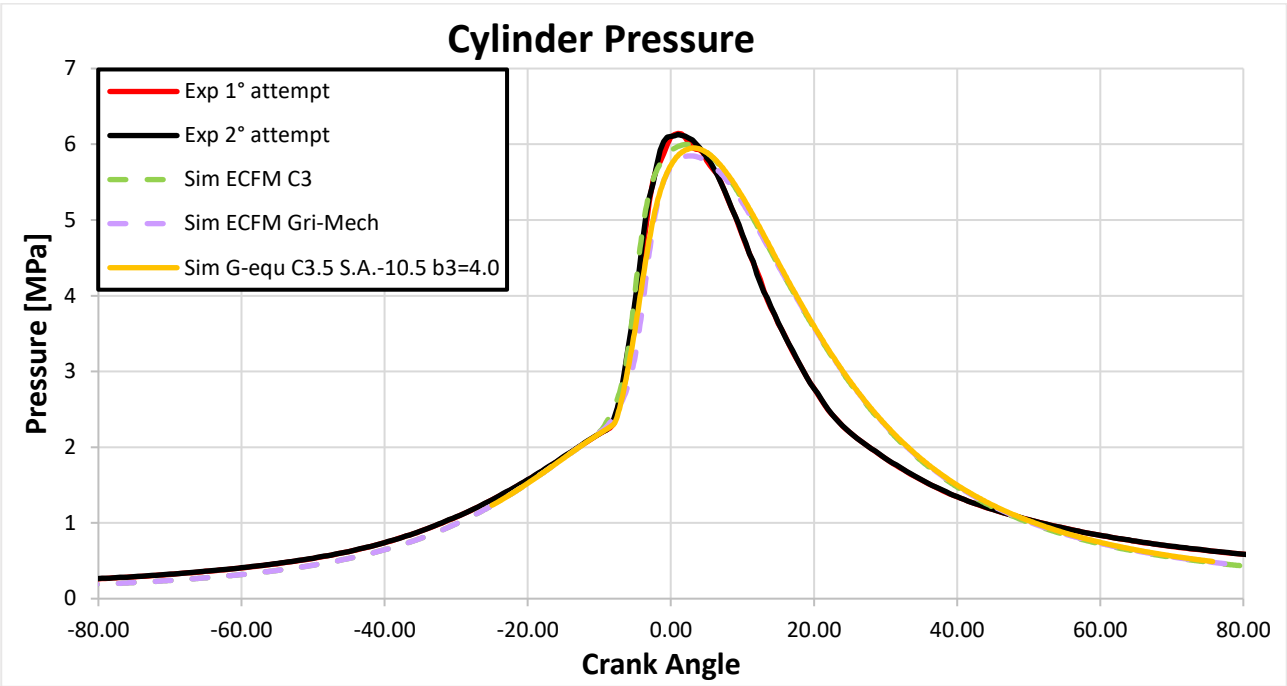


Figura 18: pressione in camera-caso HR 0.5 magro

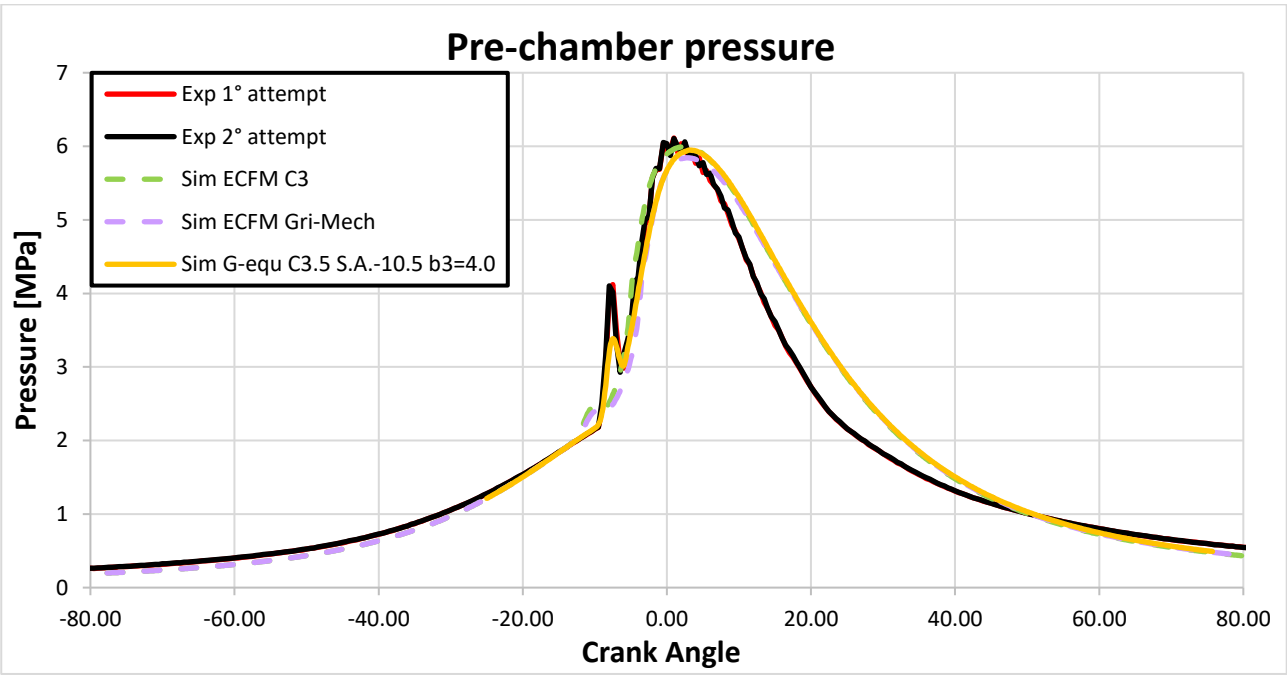


Figura 19: pressione in precamera-caso HR 0.5 magro

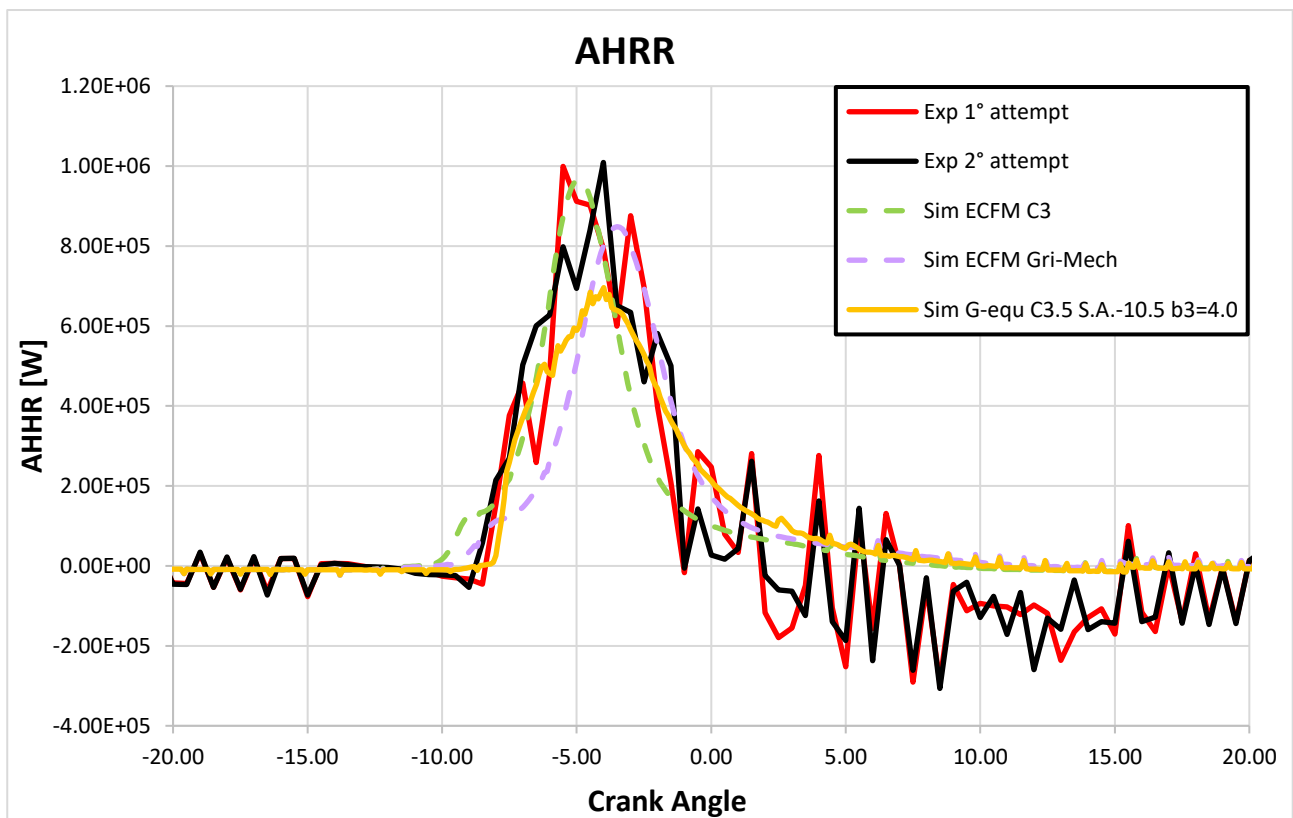


Figura 20: rilascio termico-caso HR 0.5 magro

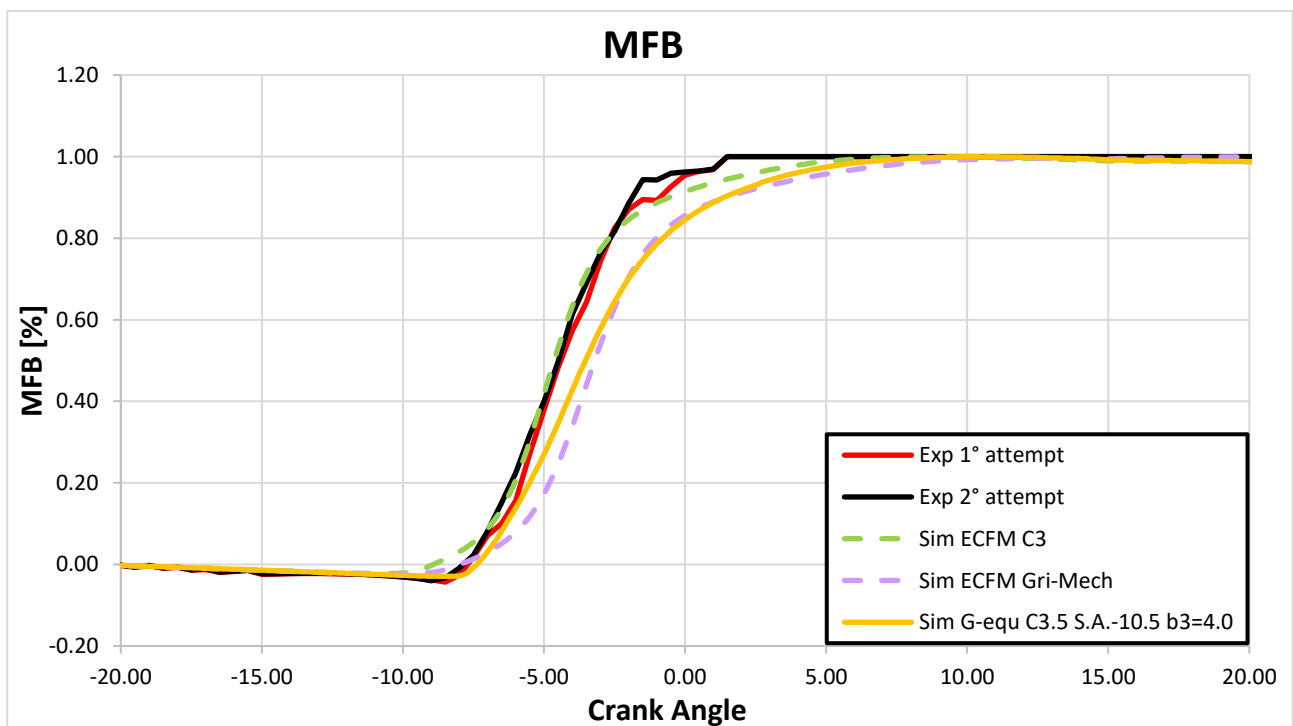


Figura 21: frazione di massa bruciata-caso HR 0.5 magro

Caso HR 0.75 $\Phi=1$

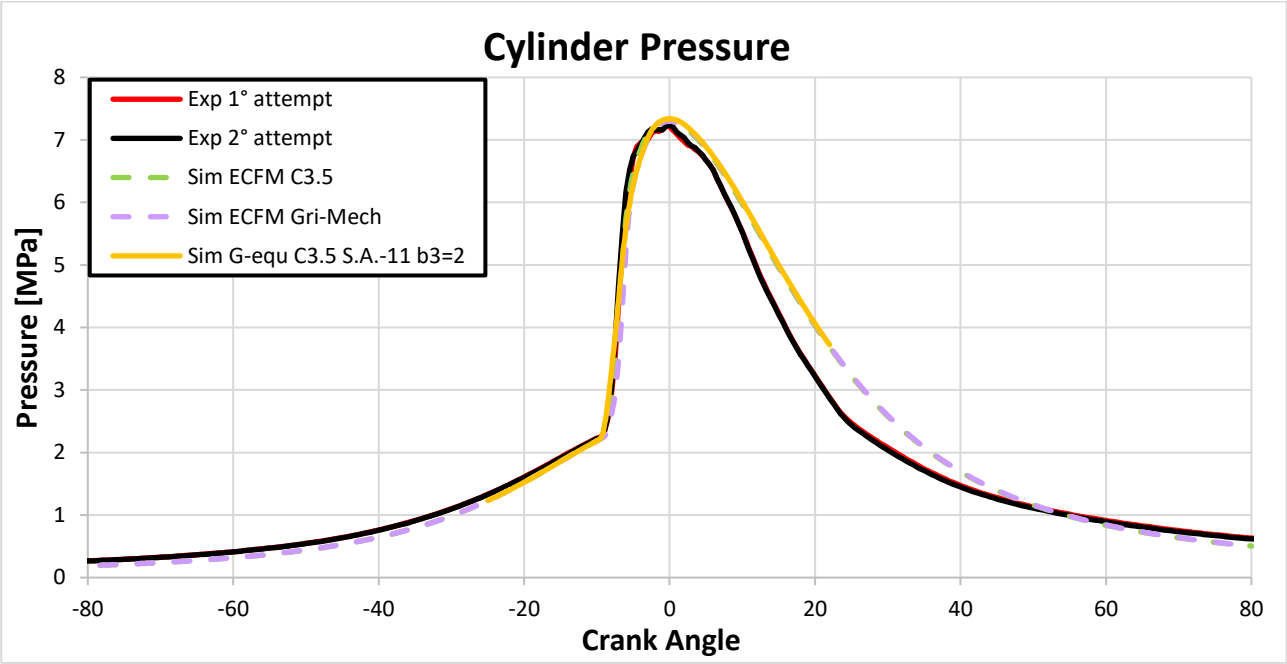


Figura 22: pressione in camera-caso HR 0.75 stechiometrico

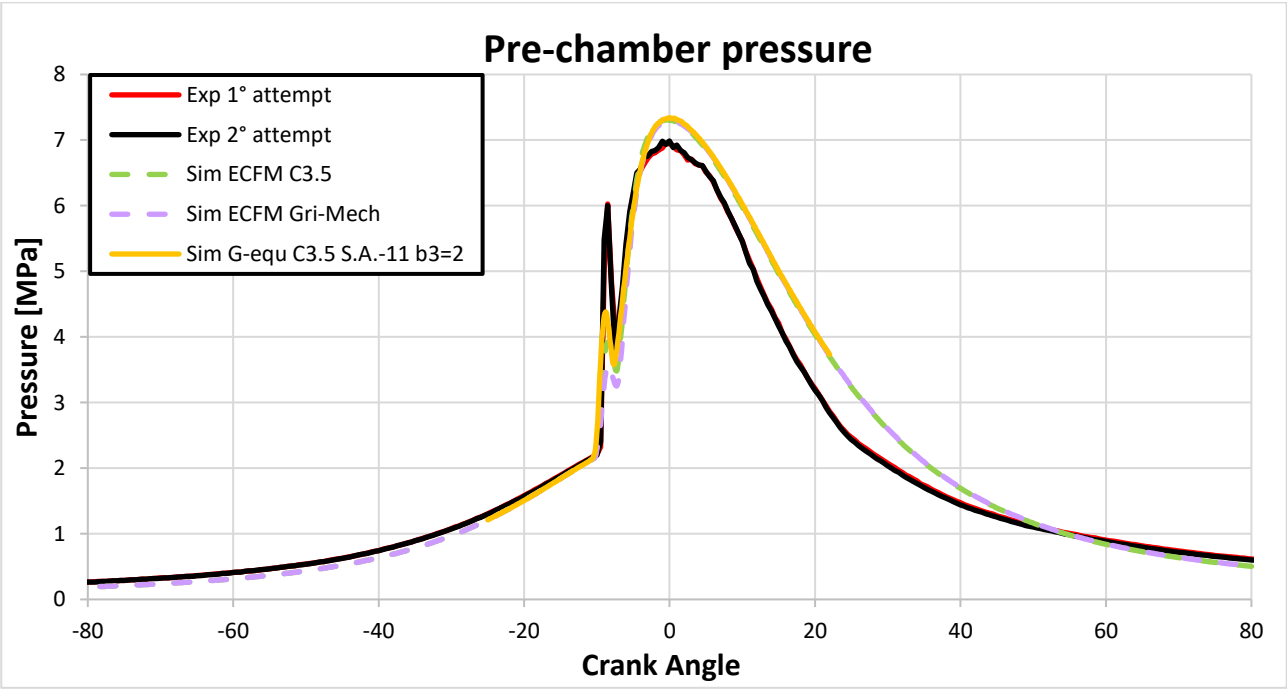


Figura 23: pressione in precamera-caso HR 0.75 stechiometrico

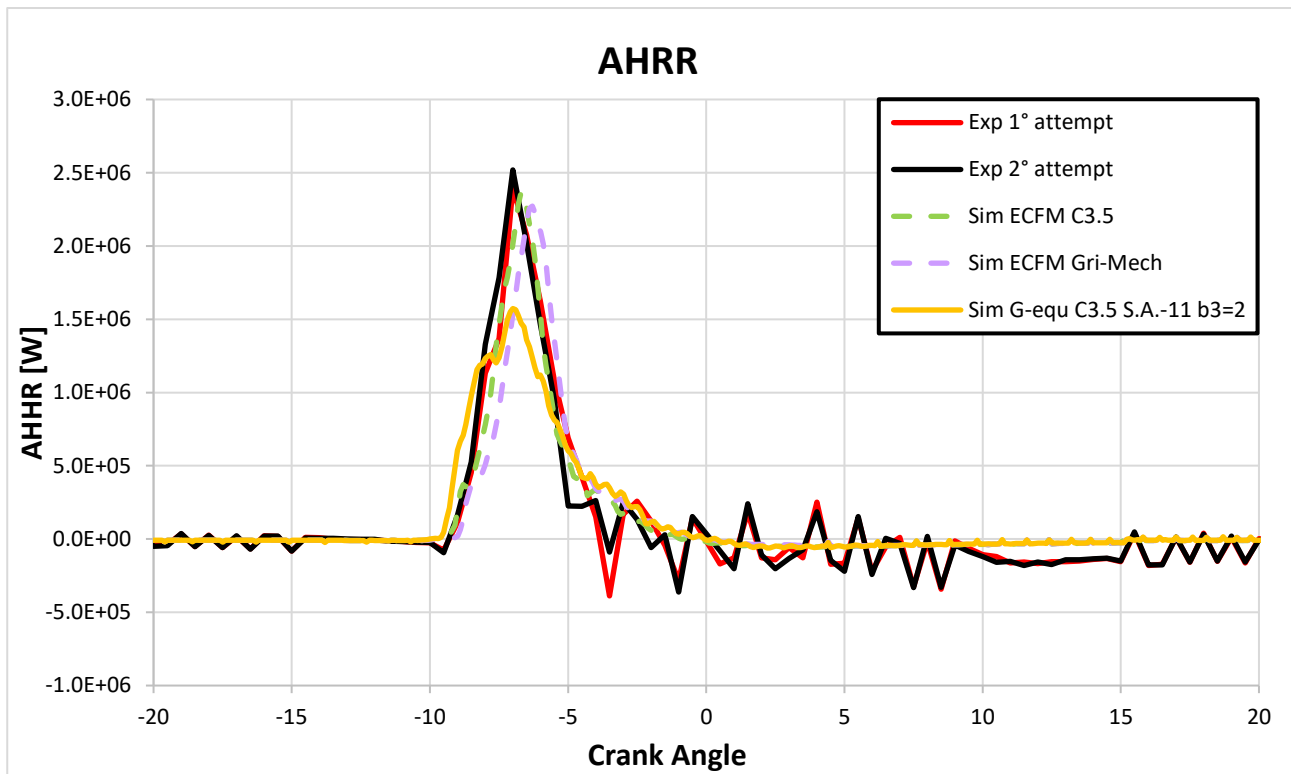


Figura 24: rilascio termico-caso HR 0.75 stechiometrico

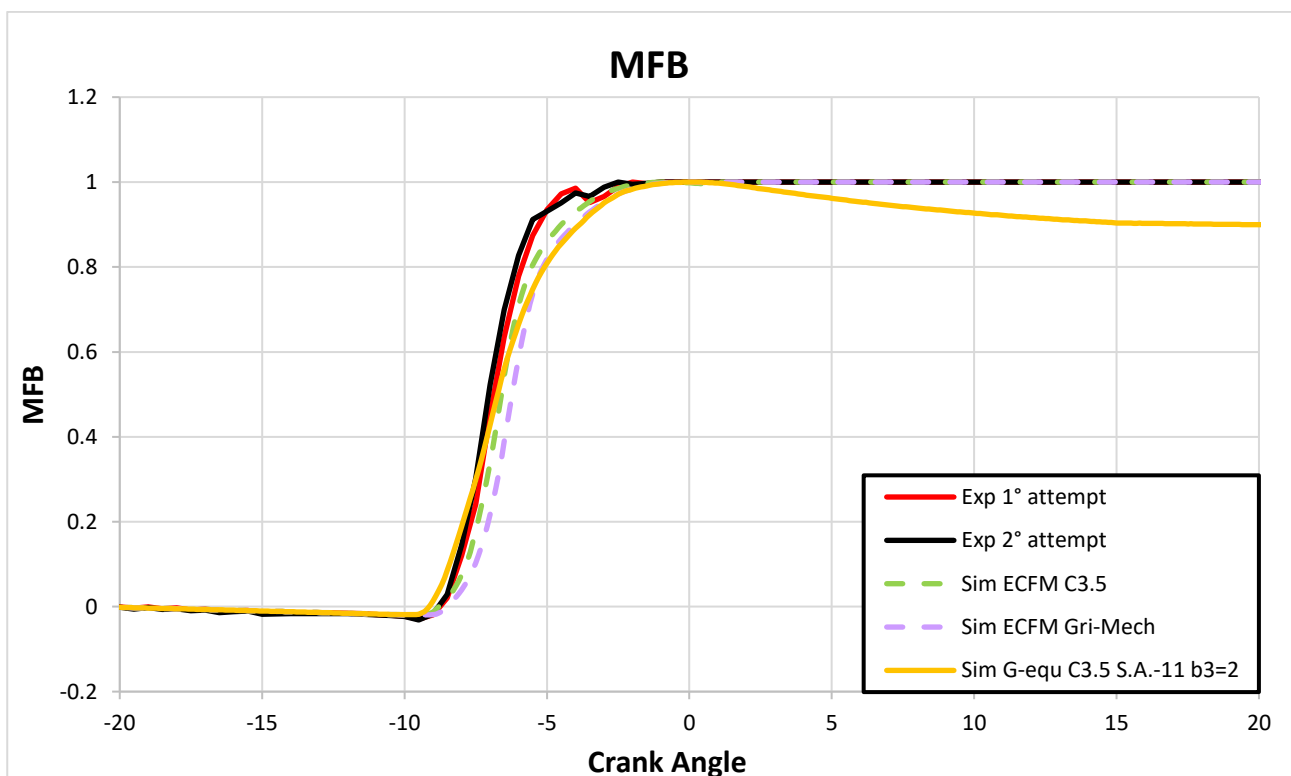


Figura 25: frazione di massa bruciata-caso HR 0.75 stechiometrico

Caso HR 0.75 $\Phi=0.625$

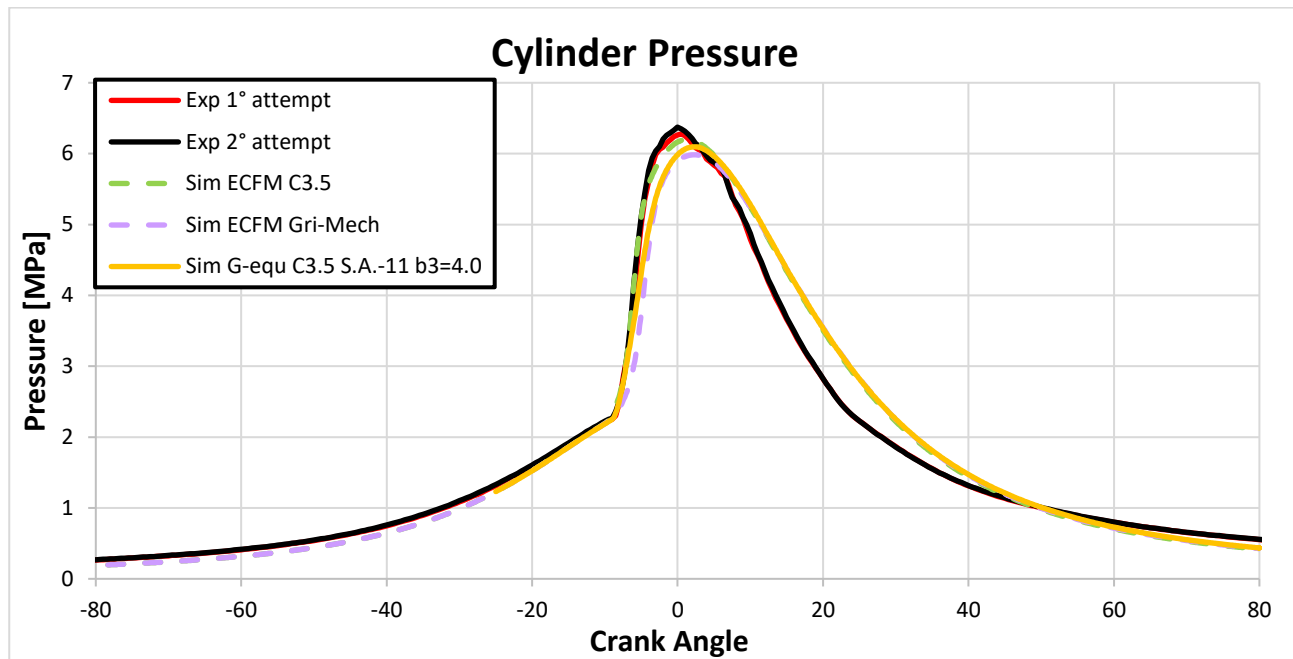


Figura 26: pressione in camera-caso HR 0.75 magro

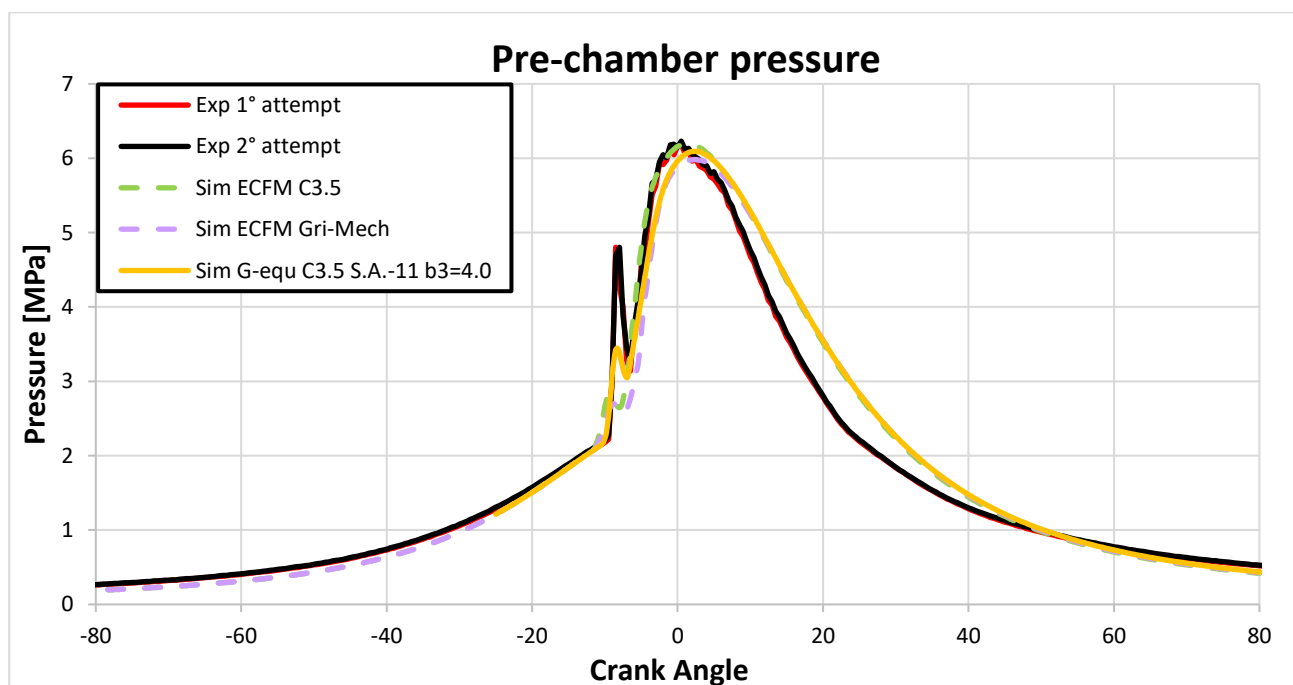


Figura 27: pressione in precamera-caso HR 0.75 magro

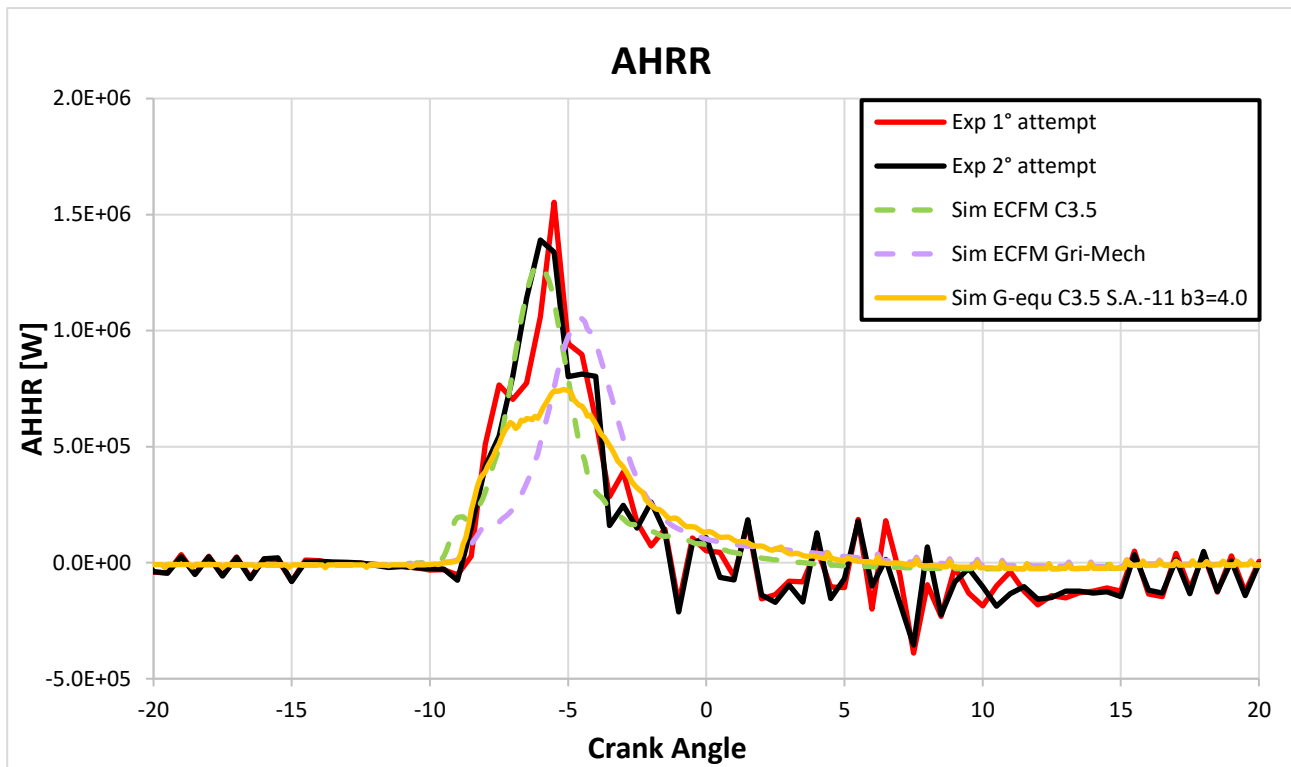


Figura 28: rilascio termico-caso HR 0.75 magro

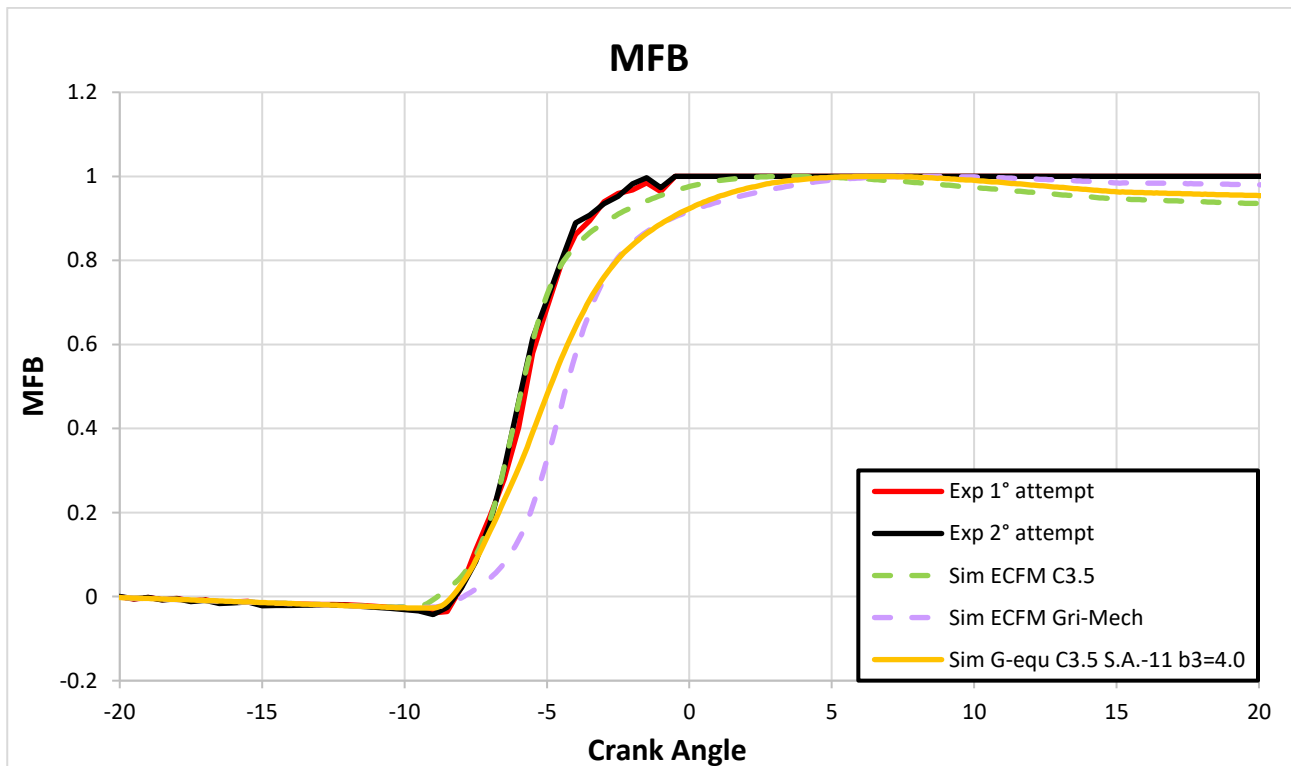


Figura 29: frazione di massa bruciata-caso HR 0.75 magro

Caso HR 1 $\Phi=1$

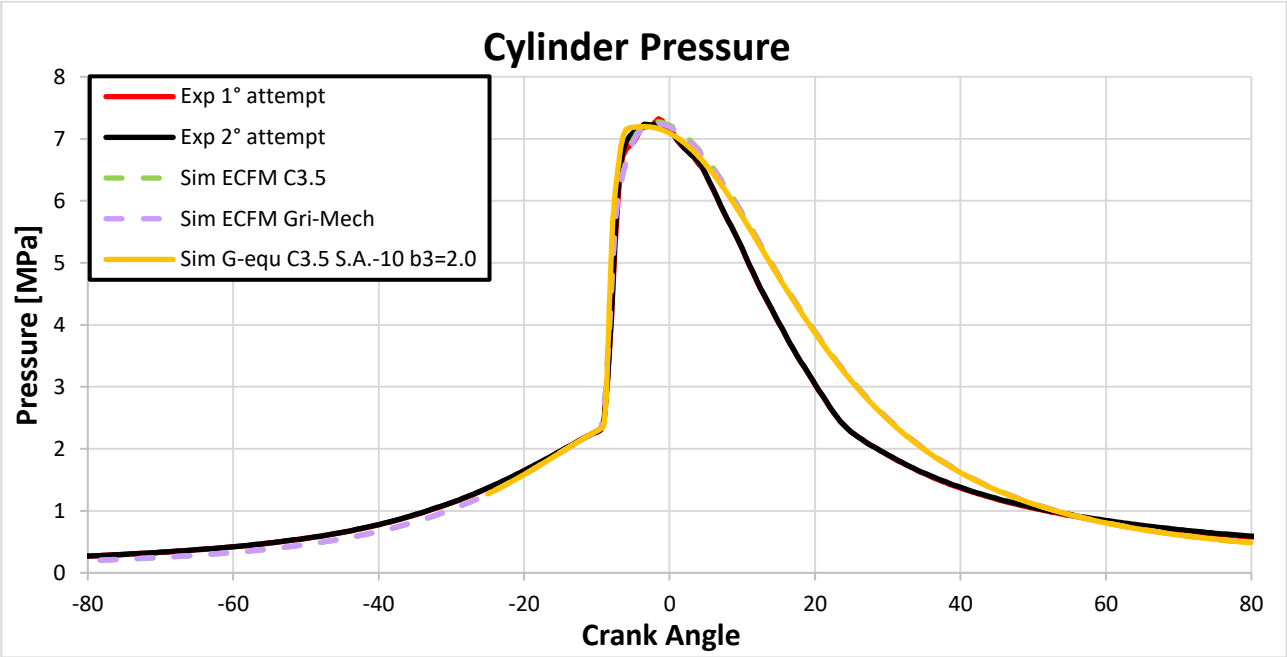


Figura 30: pressione in camera-caso HR 1 stechiometrico

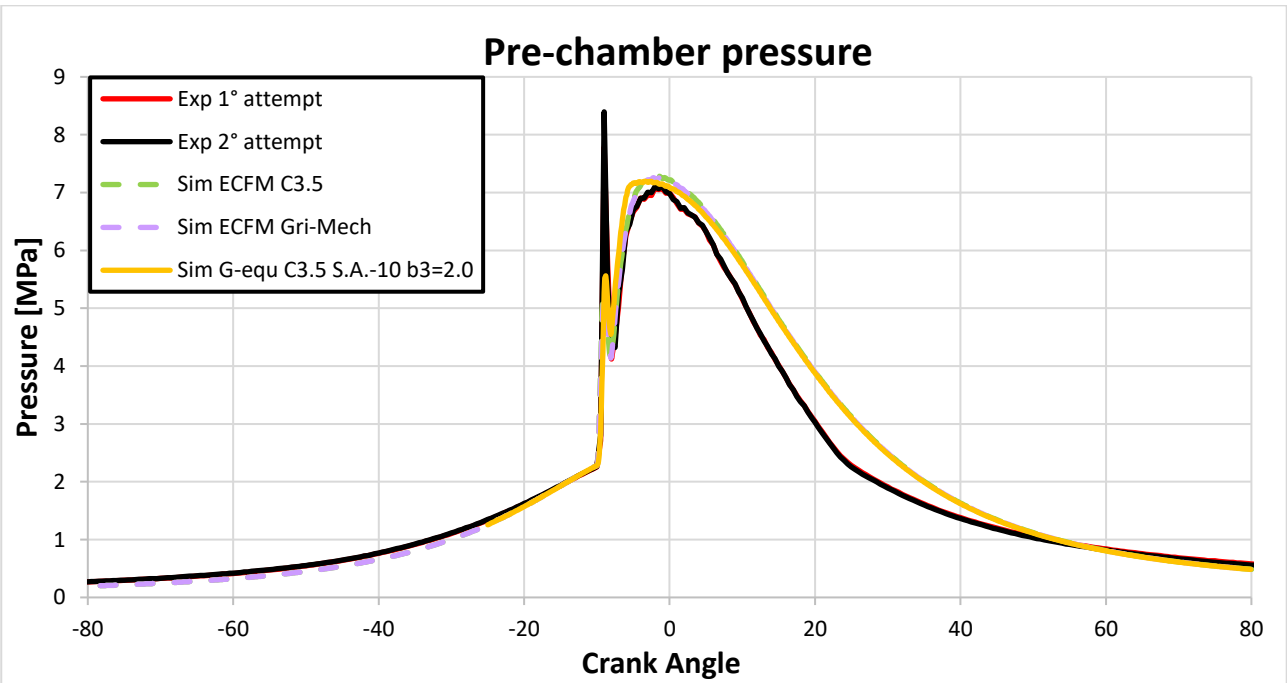


Figura 31: pressione in precamera-caso HR 1 stechiometrico

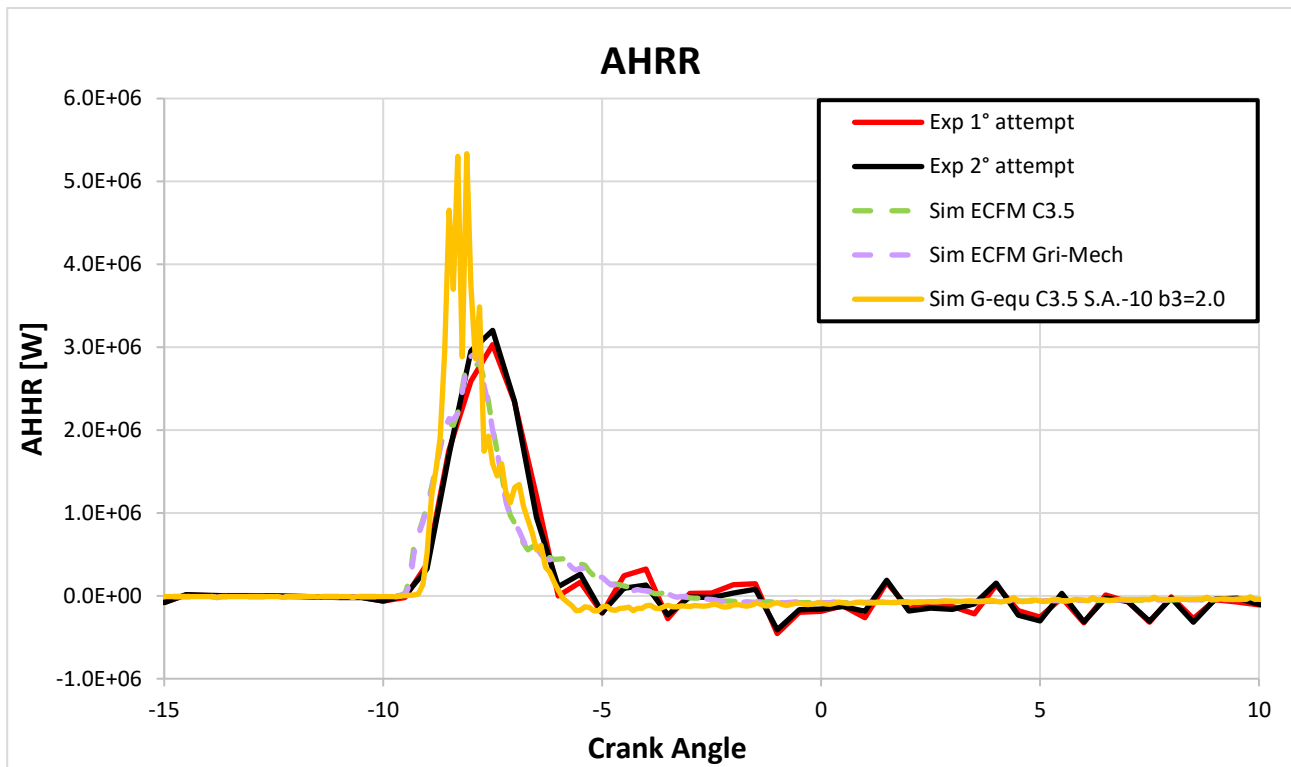


Figura 32: rilascio termico-caso HR 1 stechiometrico

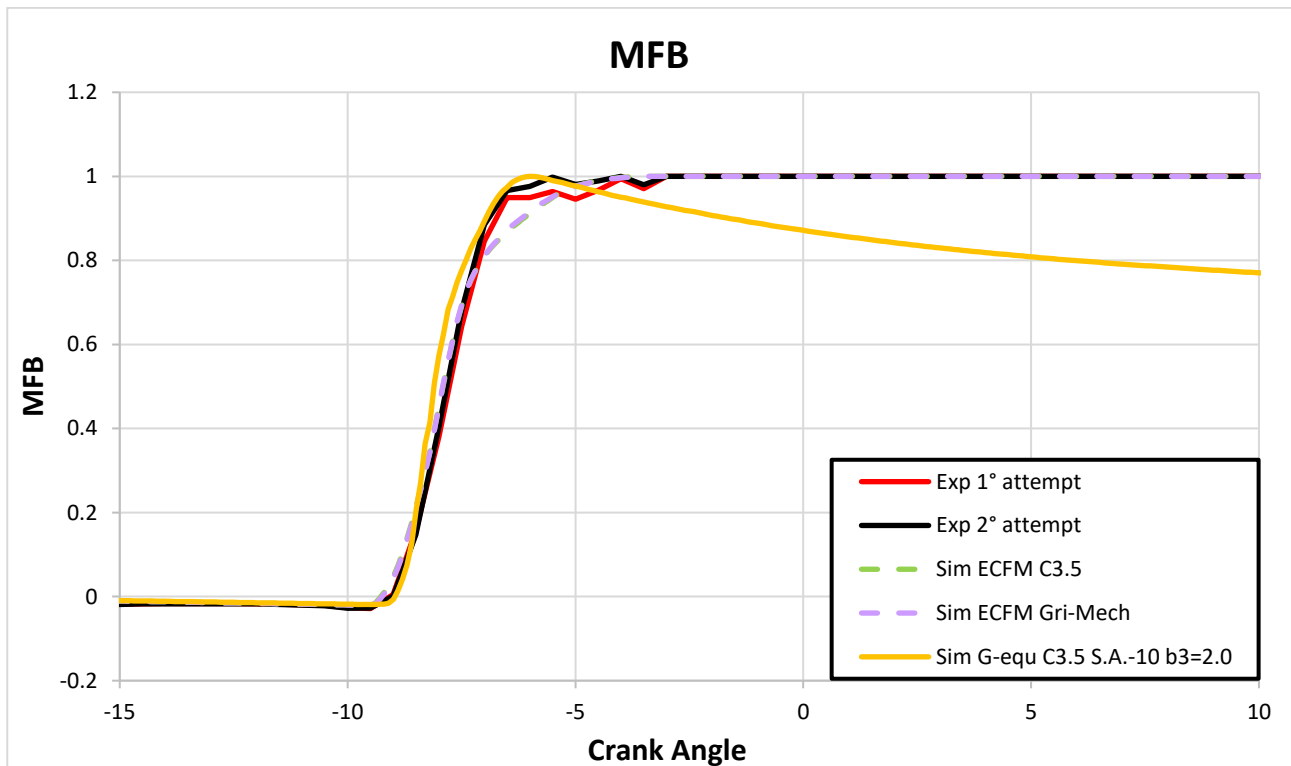


Figura 33: frazione di massa bruciata-caso HR 1 stechiometrico

Caso HR 1 $\Phi=0.625$

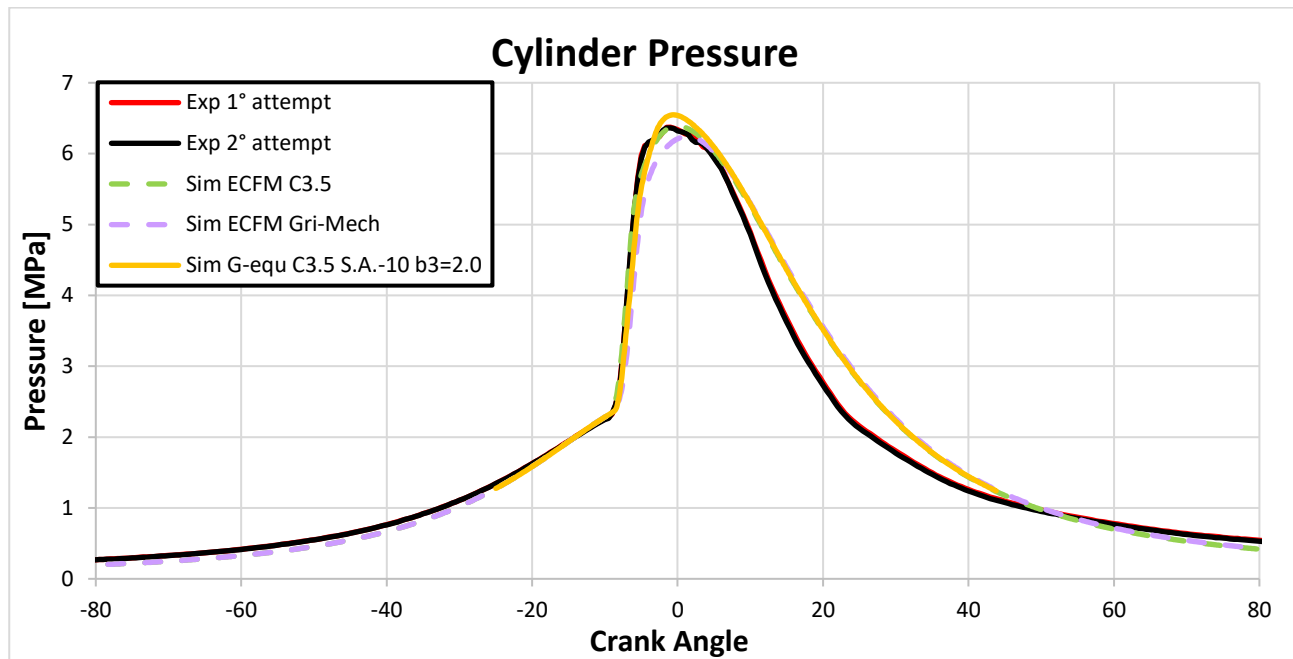


Figura 34: pressione in camera-caso HR 1 magro

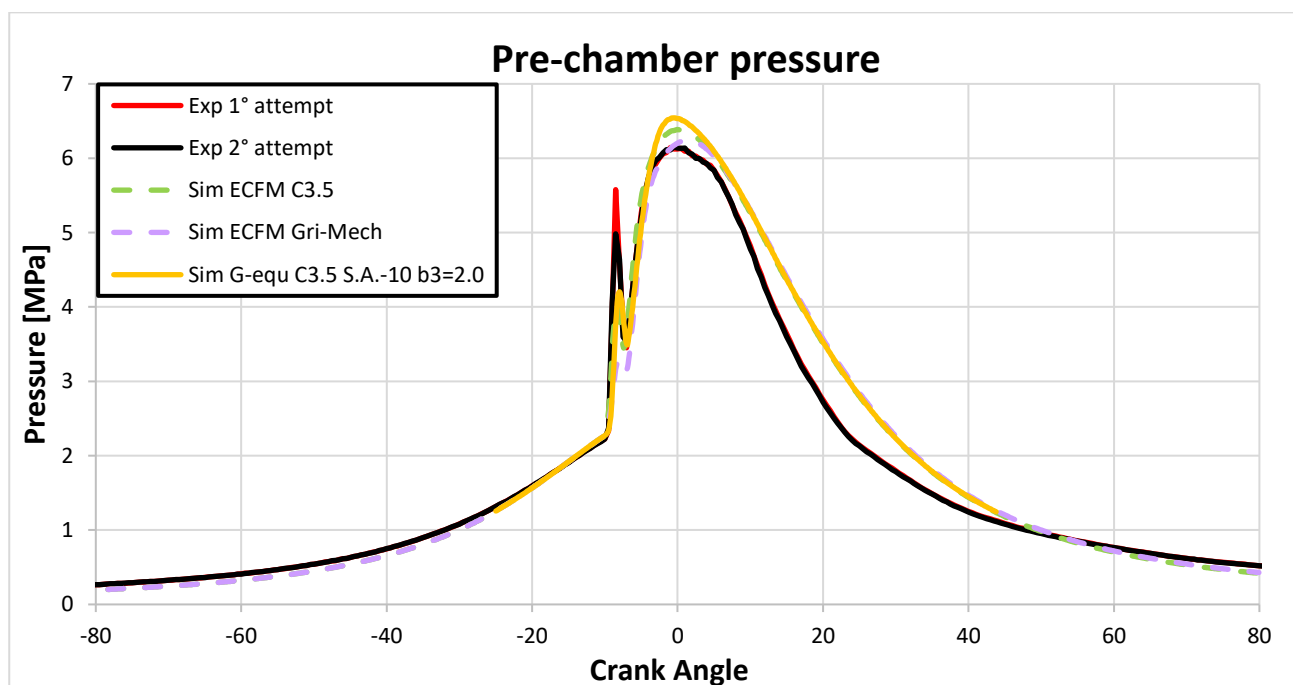


Figura 35: pressione in precamera-caso HR 1 magro

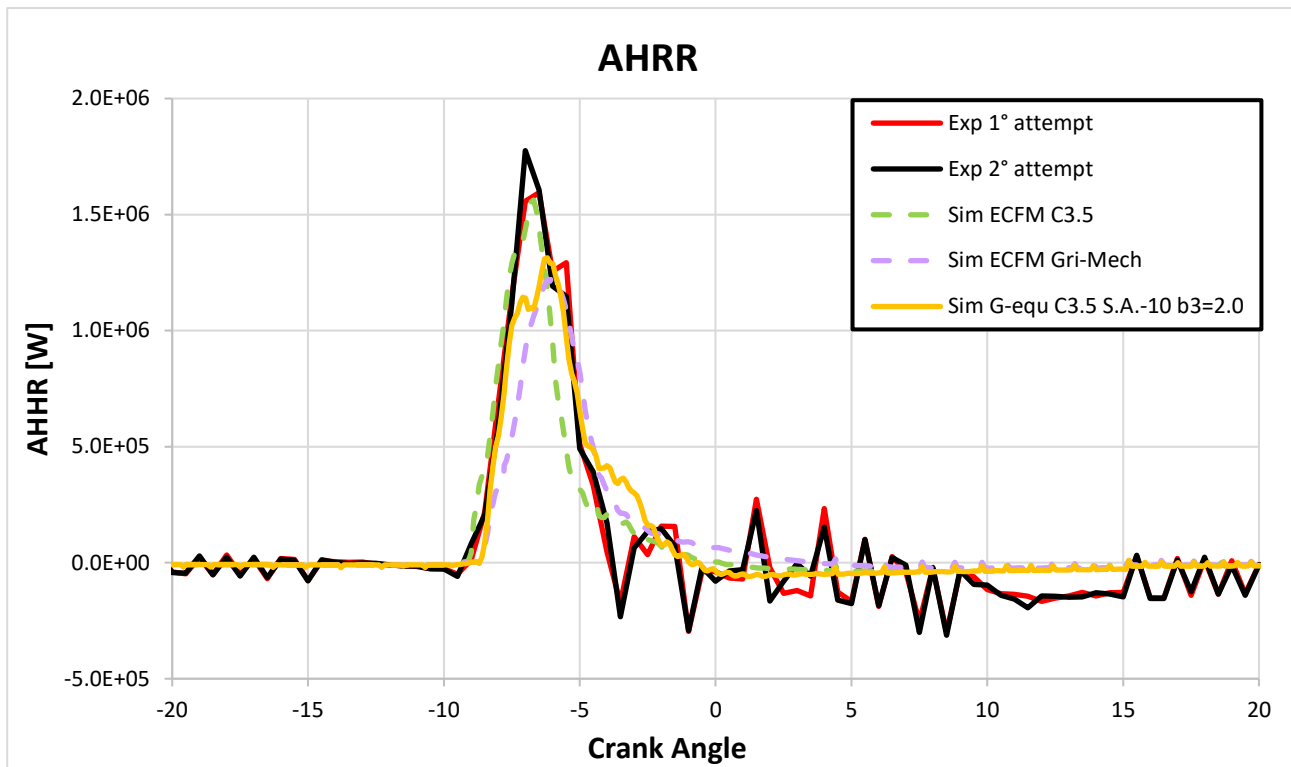


Figura 36: rilascio termico-caso HR 1 magro

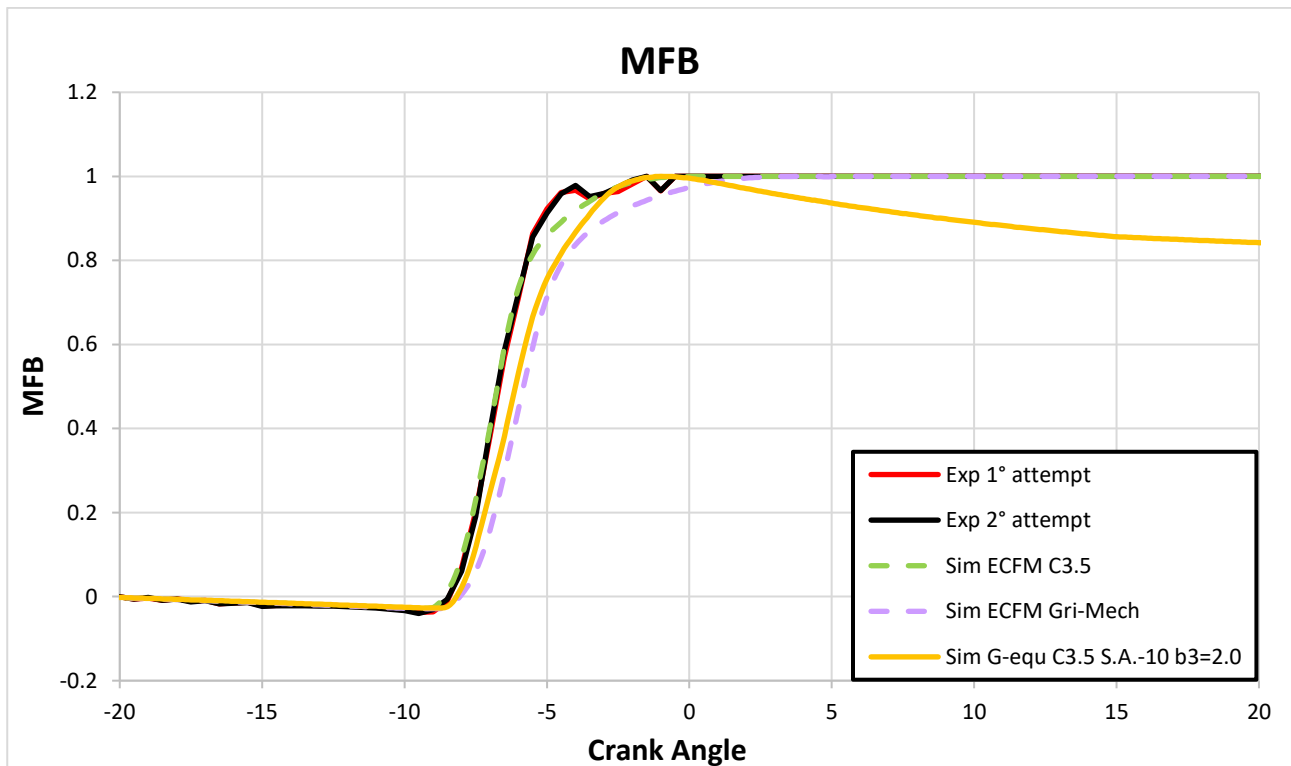


Figura 37: frazione di massa bruciata-caso HR 1 magro

Accesso ottico

Di seguito sono riportate a confronto per ogni caso studio le immagini ottenute tramite accesso ottico al motore RCEM nelle prove sperimentali con quelle ottenute dalle simulazioni numeriche al fine di valutarne differenze morfologiche e nella fase della propagazione del fronte di fiamma per quattro istanti diversi del processo di combustione. Si riportano inoltre, per ogni istante selezionato dalle simulazioni numeriche, la vista in sezione della camera di combustione con l'andamento delle temperature interne alla camera stessa e la vista in 3D della progressione del fronte di fiamma, riprodotta attraverso il tracciamento di superfici iso-temperature a 2000 K. Le immagini numeriche sono state ottenute tramite software Tecplot, l'estensione grafica di Converge Studio per l'elaborazione dei risultati e la creazione di grafici che possano catturare al meglio gli andamenti bidimensionali e tridimensionali nel tempo di tutte le grandezze fisiche coinvolte nella risoluzione delle equazioni del trasporto del modello di combustione.

CASO HR 0.25 $\Phi=1$

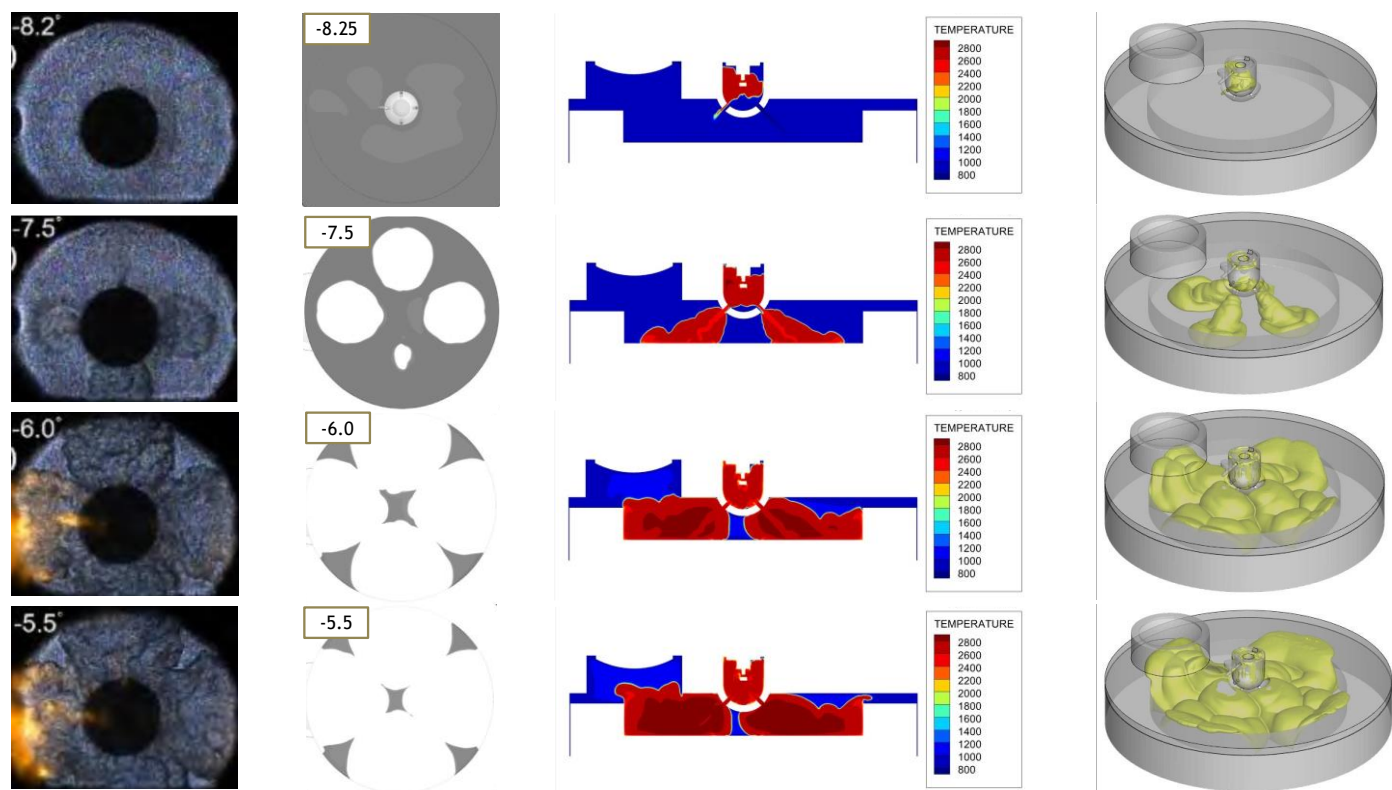


Figura 38: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.25 stechiometrico

CASO HR 0.25 $\Phi=0.625$

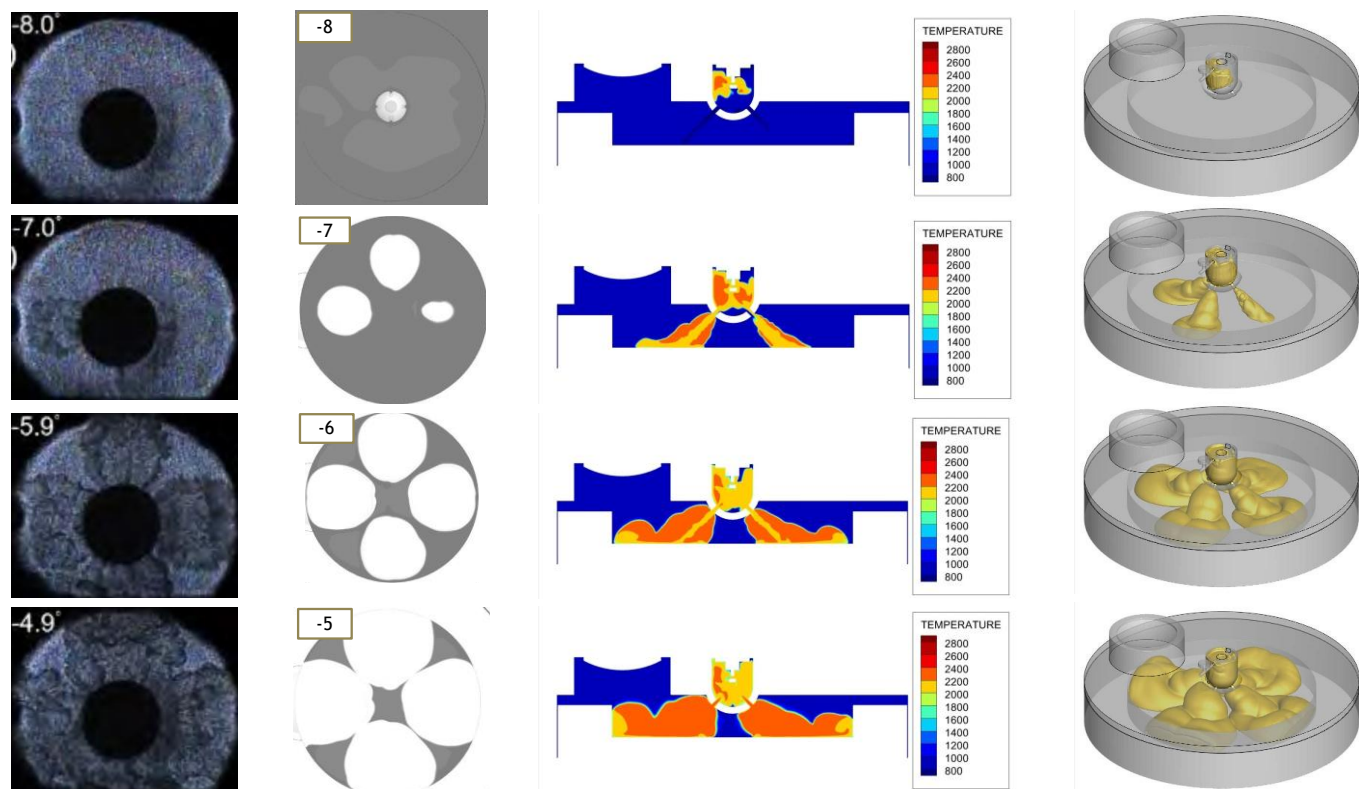


Figura 39: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.25 magro

CASO HR 0.5 $\Phi=1$

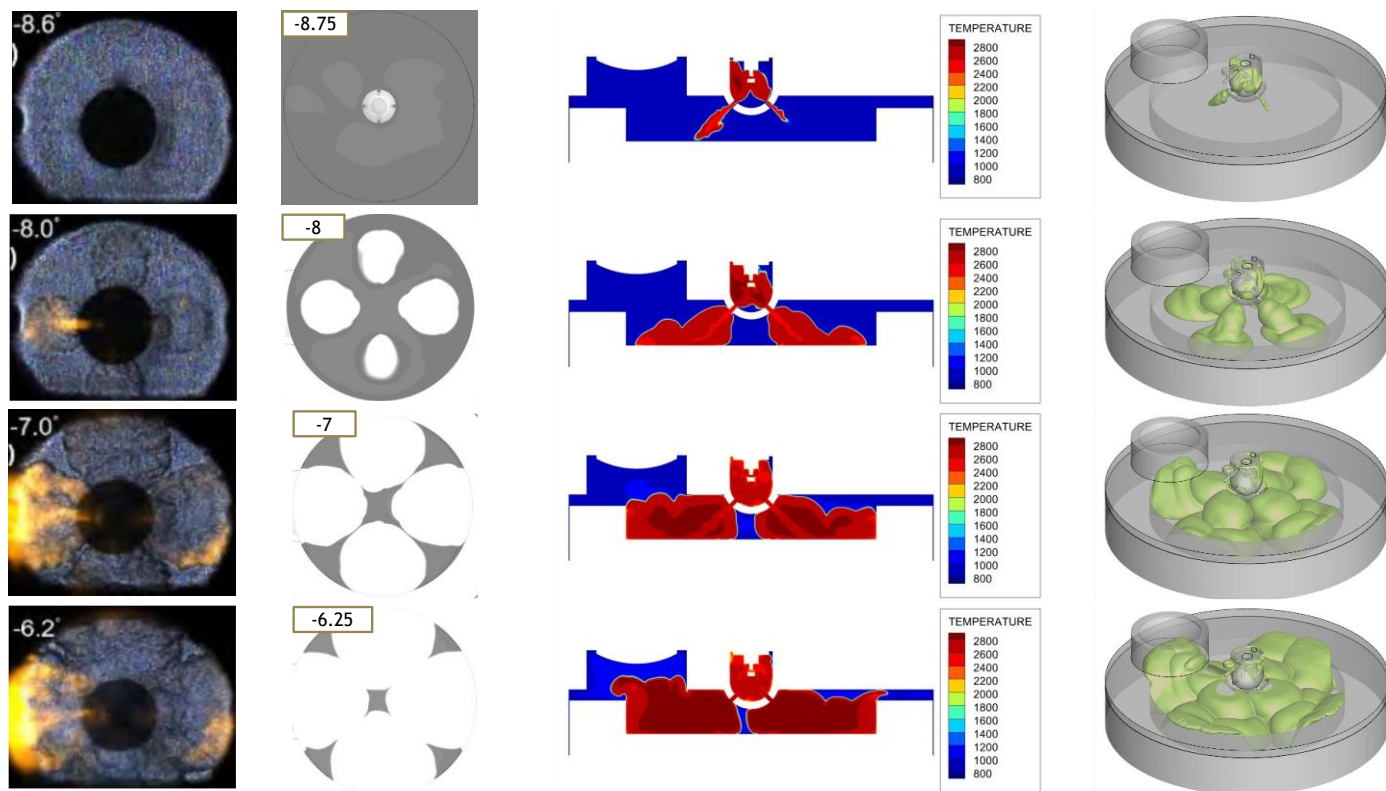


Figura 40: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.5 stechiometrico

CASO HR 0.5 $\Phi=0.625$

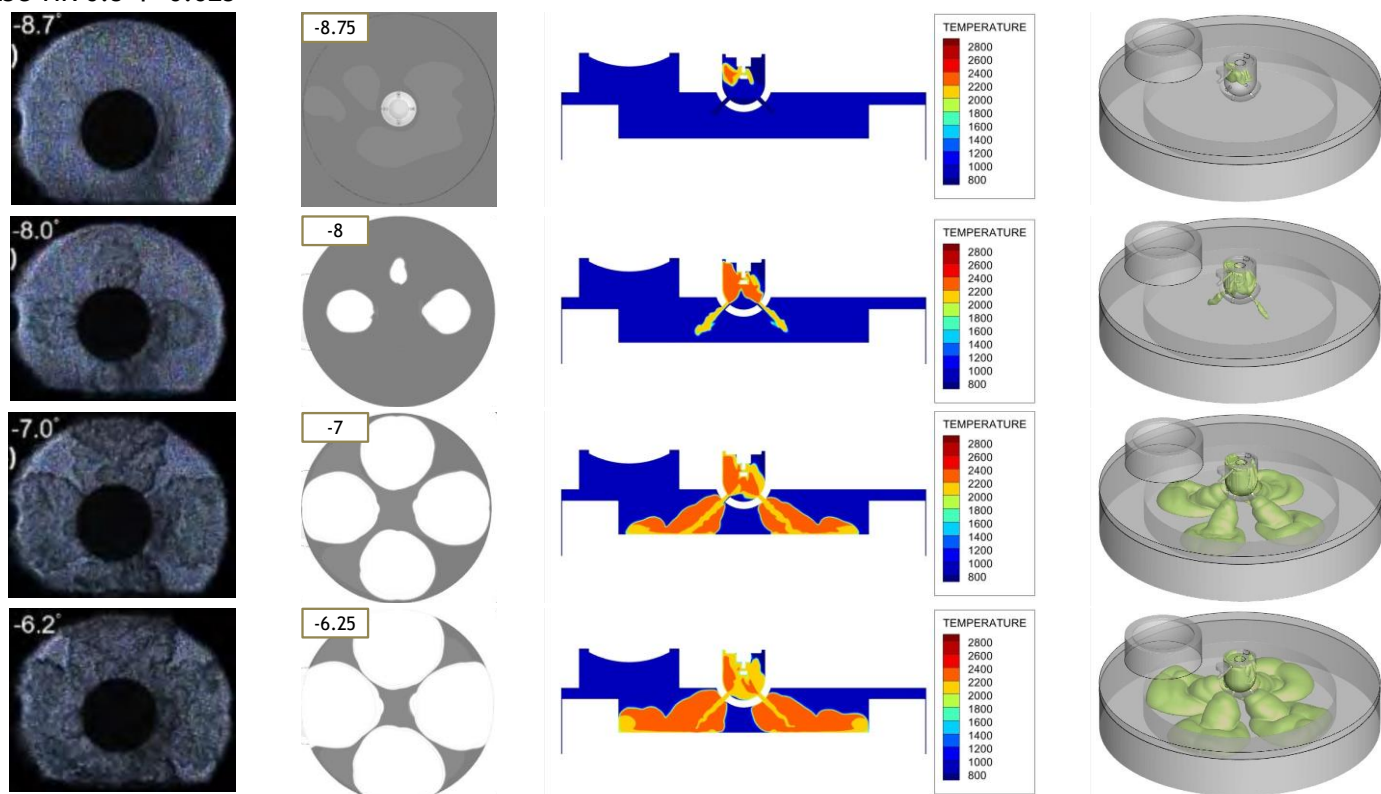


Figura 41: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.5 magro

CASO HR 0.75 $\Phi=1$

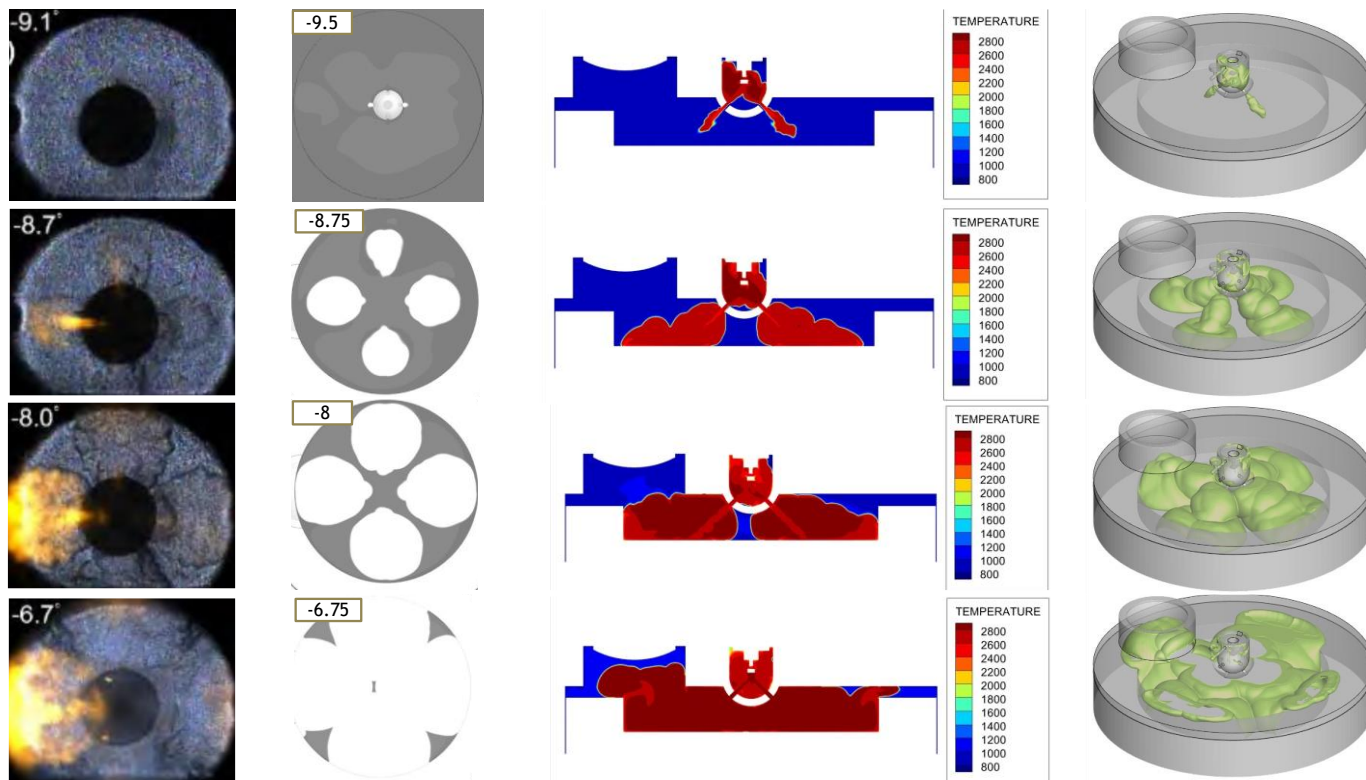


Figura 42: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.75 stechiometrico

CASO HR 0.75 $\Phi=0.625$

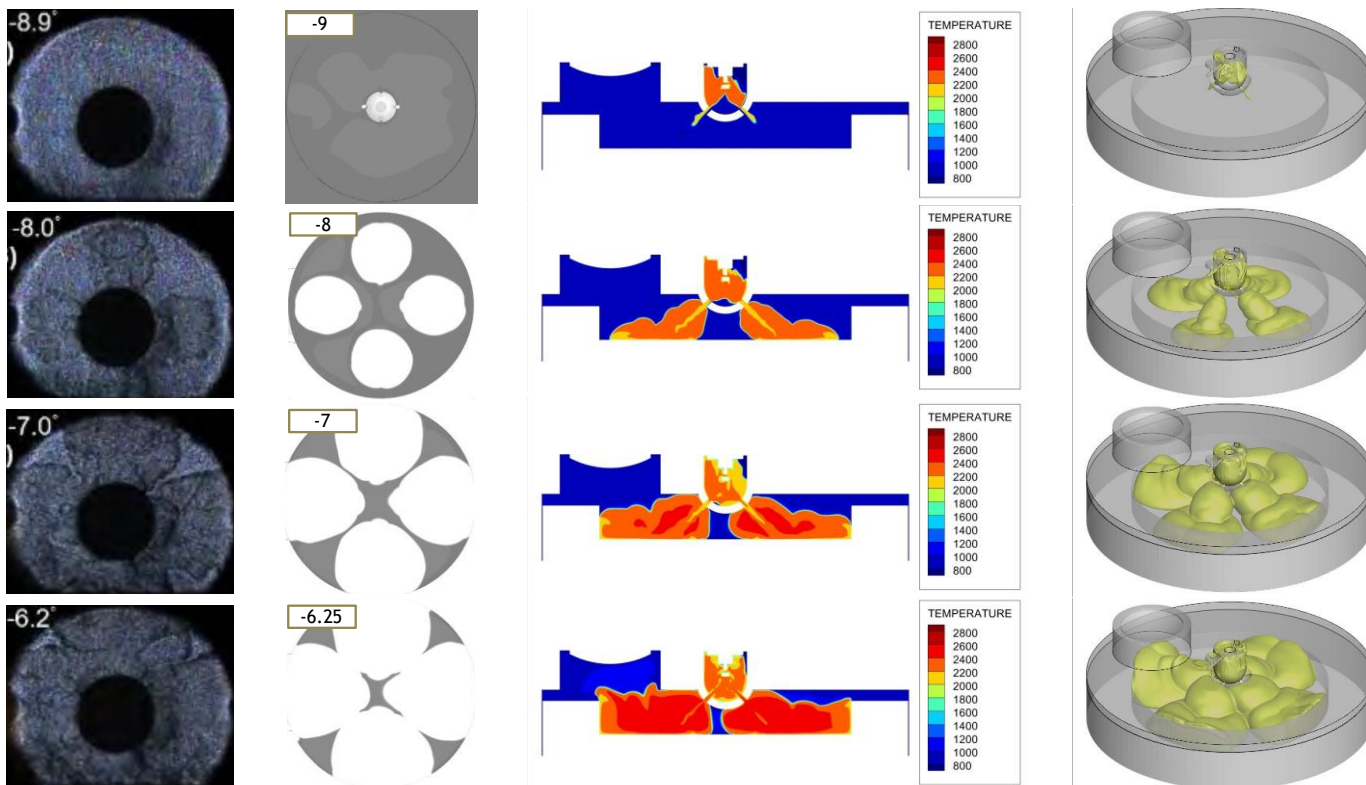


Figura 43: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 0.75 magro

CASO HR 1 $\Phi=1$

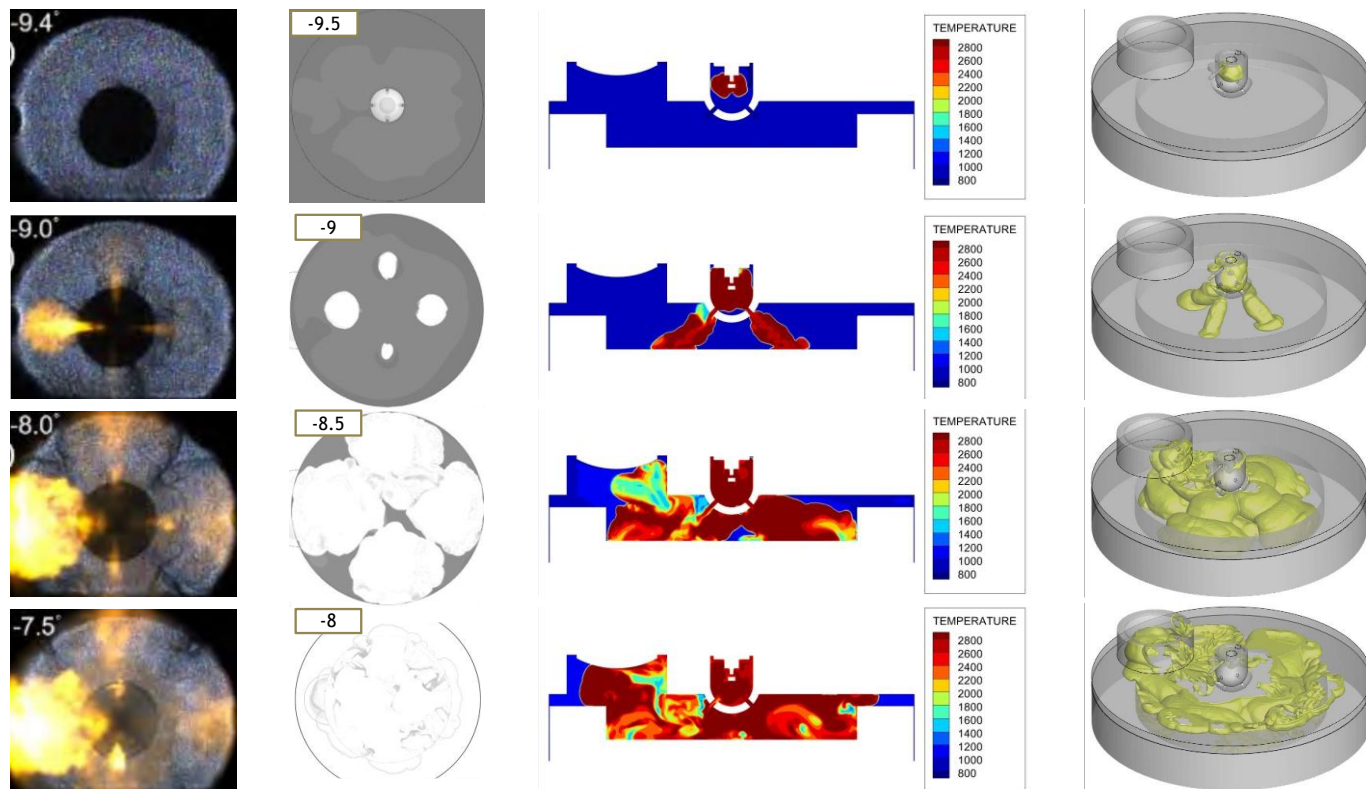


Figura 44: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 1 stechiometrico

CASO HR 1 $\Phi=0.625$

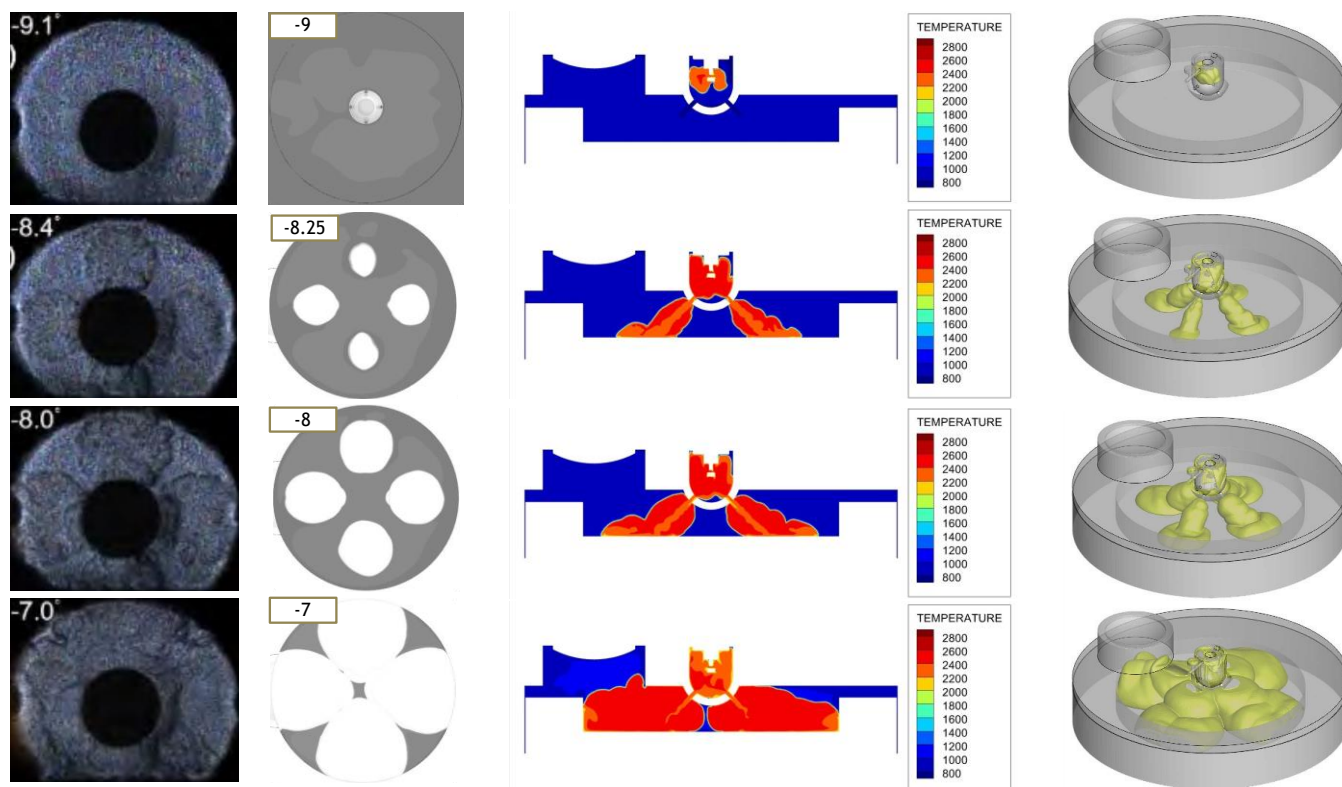


Figura 45: accesso ottico sperimentale vs numerico-caso HR 1 magro

Commenti generali

Una prima considerazione che può essere fatta per tutti i casi presi in analisi riguarda gli andamenti delle pressioni in camera e precamera di combustione: osservando i grafici si può notare una tendenza generale delle simulazioni numeriche a riportare in fase di espansione ($CAD > 0^\circ$) valori di pressione più alti di quelli effettivi misurati sperimentalmente. Ciò è dovuto al fatto che nelle simulazioni è stata fatta implicitamente l'assunzione di avere pareti del cilindro perfettamente ermetiche, assunzione che non corrisponde esattamente al caso reale: tutti i motori sono soggetti al cosiddetto fenomeno del "blow-by", ossia piccole fughe di gas dal volume di controllo della camera di combustione attraverso interstizi e anelli di tenuta del pistone, che influiscono negativamente sull'efficienza del processo di combustione in quanto riducono i valori effettivi di pressione e di conseguenza il lavoro estraibile dal ciclo motore. Su Converge è possibile implementare nel setup di simulazione un modello di perdite per blow-by, ma in questo caso specifico si è voluta trascurare una modellizzazione di questo fenomeno in quanto non va a influire sul processo di combustione vero e proprio: se si osserva l'andamento della frazione di massa bruciata in funzione dell'angolo di manovella, nel peggiore dei casi ($HR = 0,25$ a miscela magra) si raggiunge il completamento della combustione ($MFB=1$) a circa 10° dopo il PMS.

In secondo luogo, come ci si poteva aspettare, dagli andamenti di temperatura nelle viste in sezione delle simulazioni numeriche si evince un aumento dei valori di quest'ultima sia all'aumentare di Φ a pari HR , in quanto aumenta la reattività della miscela, sia all'aumentare di HR per il maggior potere calorifico dell'idrogeno rispetto al metano: si passa dai circa 2400 K raggiunti nel caso $HR=0,25$ a miscela magra agli oltre 2800 K del caso $HR=1$ stechiometrico.

Osservando invece le simulazioni ottenute con modello ECFM, si nota caso per caso una migliore corrispondenza con lo sperimentale dell'accoppiamento col meccanismo chimico C3 piuttosto che con il GRI-Mech, a dimostrazione del fatto che il C3 riesce a stimare più fedelmente le velocità laminari di combustione per miscele a base di idrogeno e metano, mentre il GRI-Mech si mostra un meccanismo più adatto per miscele a base di idrocarburi come il gas naturale. È alla base di questa considerazione che si è scelto di accoppiare al modello G-equation il meccanismo C3.

Entrando nell'analisi delle simulazioni G-equation, sicuramente un loro punto di forza rispetto alle simulazioni ECFM sta nella migliore fasatura dell'andamento di pressione in precamera, a dimostrazione di come riesca a riprodurre meglio i fenomeni di accensione e propagazione della fiamma nei primi istanti della combustione; se si osserva il primo picco di pressione in precamera, la simulazione G-equation è l'unica che riesce a ripercorrere quasi perfettamente l'andamento della curva sperimentale con anticipi di accensione pressoché pari al caso reale. Di seguito si riporta l'anticipo di accensione (SA) adottato per ogni caso di HR e di Φ .

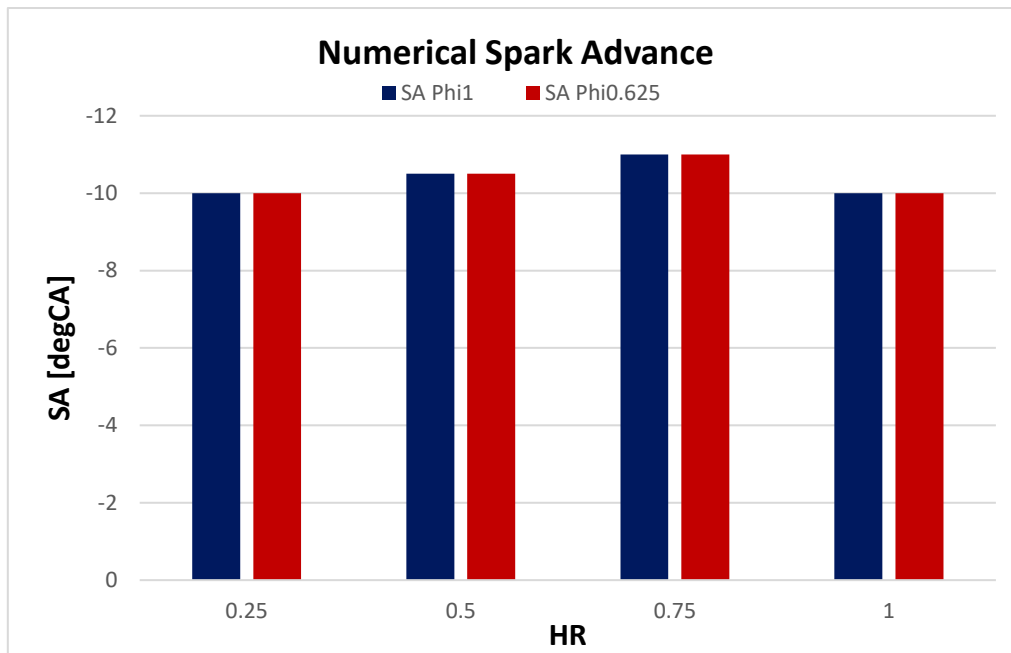


Figura 46: anticipo di accensione numerico

Si evince che il massimo anticipo d'accensione, pari a -11 CAD, è stato adottato per $HR=0.75$, a fronte di un SA pari a -10 CAD nel caso reale, mentre nelle simulazioni ECFM si è dovuto ricorrere anche ad anticipi di -14 CAD. A pari HR non c'è differenza di SA tra caso magro e stechiometrico, a dimostrazione di come il modello G-equation si adatti bene al meccanismo chimico C3 nelle diverse condizioni operative. Nei casi di miscela idrogeno-metano si osserva un trend di aumento di SA all'aumentare della frazione di idrogeno presente nella miscela, ma più in generale con l'aumentare di HR si osserva un peggioramento delle performance del modello G-equation sia rispetto al modello ECFM sia rispetto allo sperimentale, soprattutto se si guardano gli andamenti di AHRR e MFB dei casi a $\Phi=0.625$. Una possibile causa di questo trend è la minore affidabilità del meccanismo C3 all'aumentare della frazione di idrogeno all'interno della miscela, basti pensare che anche il C3 è nato come meccanismo di modellazione delle reazioni chimiche di idrocarburi, per cui la sua compatibilità con miscele a base di idrogeno non è ancora ottimale, probabilmente lo diventerà in future versioni riviste del meccanismo.

Per quanto riguarda invece la calibrazione del parametro b_3 della correlazione di Peters tra velocità di fiamma laminare e turbolenta, si è riscontrato un doppio trend che riproduce fedelmente il significato fisico dell'interazione tra chimica e turbolenza: da un lato, laddove l'intensità delle reazioni chimiche è meno preponderante rispetto all'intensità di turbolenza (es. caso $HR=0.25$ $\Phi=0.625$), un incremento nel valore di b_3 incide maggiormente sulla variazione degli andamenti numerici della combustione; dall'altro lato, una stessa variazione di b_3 incide meno sulla calibrazione per valori elevati di quest'ultimo. La coerenza della correlazione di Peters sta nel fatto che non è possibile modellare la differenza tra velocità laminare e turbolenta a proprio piacimento in ogni condizione operativa: per combustioni in regime flamelet ($Da \gg 1$) la turbolenza non può influire eccessivamente sulla velocità di propagazione della fiamma, motivo per cui all'aumentare del numero di Damköhler la velocità turbolenta tende a un valore asintotico per qualunque variazione del parametro b_3 al di sopra di una certa soglia (tendenzialmente per $b_3 > 4$). Per chiarire meglio questo concetto, di seguito si evidenzia la differenza tra due casi di calibrazione del parametro b_3 e di come

la sua variazione incida diversamente tra un caso e l'altro; si riportano gli andamenti di AHRR, che sono le curve più sensibili alle differenze di calibrazione.

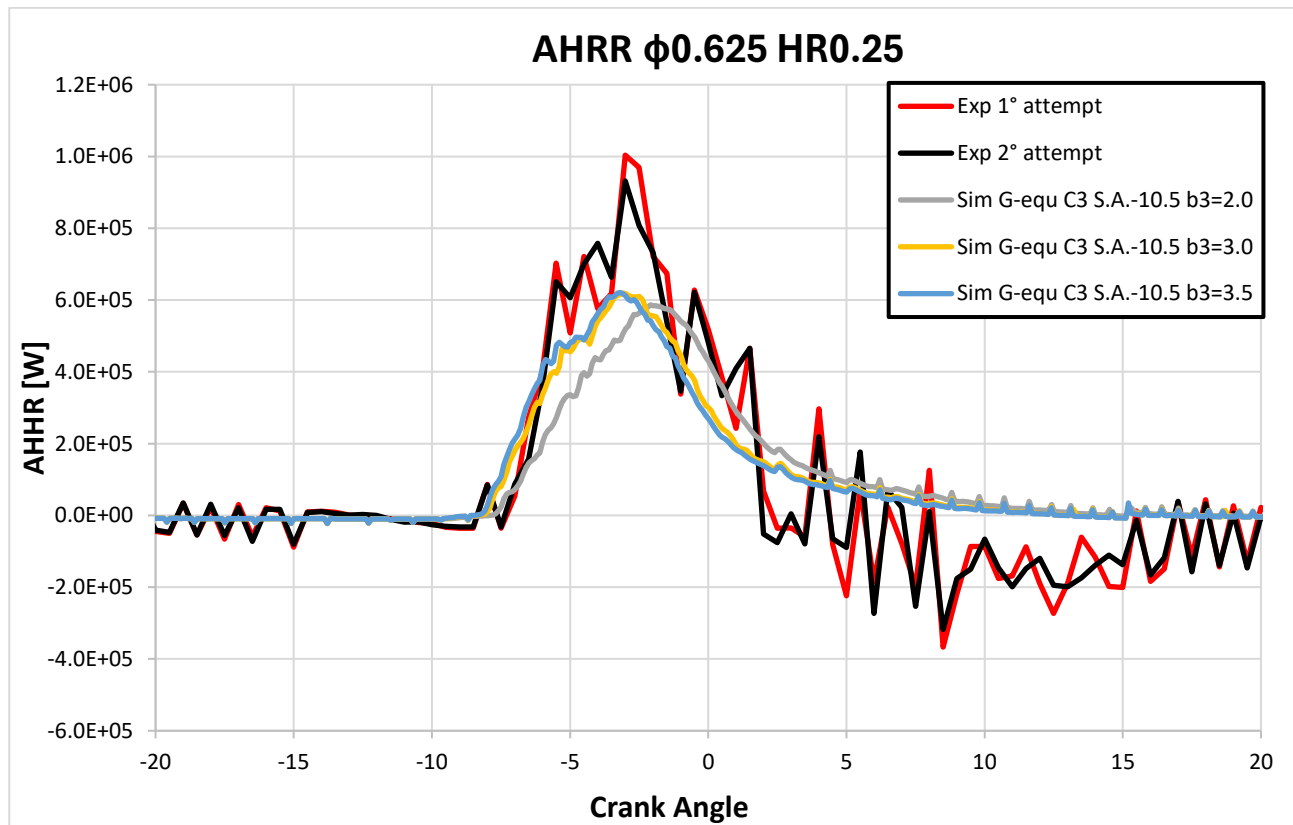


Figura 47: calibrazione parametro b_3 -caso HR 0.25 magro

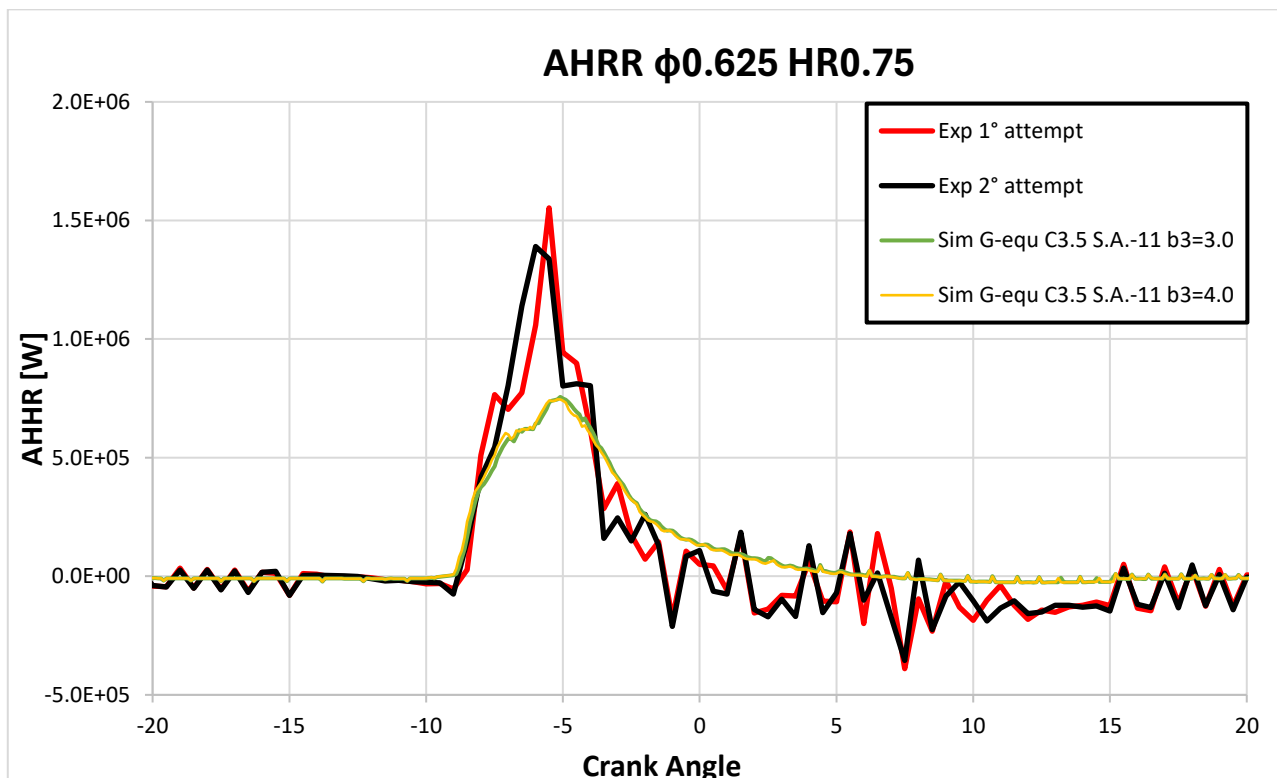


Figura 48: calibrazione parametro b_3 -caso HR 0.75 magro

Come spiegato in precedenza, nel caso HR 0.25 $\Phi=0.625$, la minore reattività della miscela permette di evidenziare meglio le differenze di calibrazione di b_3 ; tuttavia, come si può osservare, all'aumentare di b_3 le differenze tra le curve di AHRR si riducono sempre di più, a dimostrazione del fatto che non è possibile incrementare la velocità di fiamma turbolenta illimitatamente e bisogna mantenere una certa coerenza tra modello fisico e modello numerico. Nel caso HR 0.75 $\Phi=0.625$ si può osservare ancora meglio questa convergenza delle curve a causa della maggior preponderanza della chimica nella combustione ($Da \gg 1$).

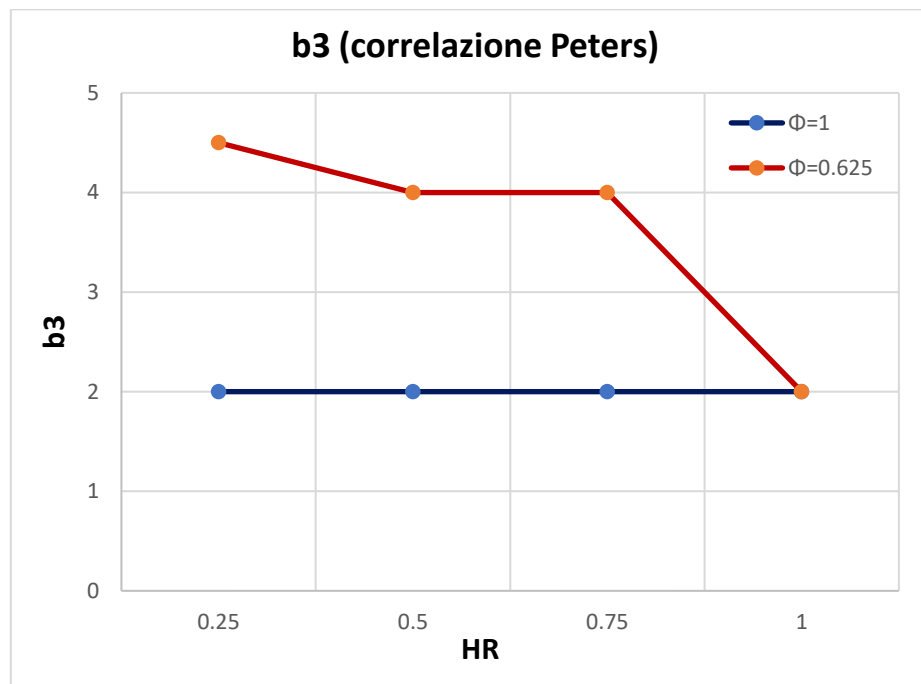


Figura 49: andamento b_3 in funzione di HR

Un'ulteriore considerazione va fatta sulla variazione del parametro b_3 tra i casi stechiometrici (curva blu in figura) e i casi a miscela magra (curva rossa): mentre nei casi stechiometrici si è riusciti a mantenere un valore costante di b_3 al variare di HR, non si può fare lo stesso discorso per i casi con $\Phi=0.625$, dove ci si è spinti a valori di b_3 fino a 4.5 per ottenere una buona calibrazione numerica dei rispettivi casi sperimentali, a dimostrazione di una migliore adattabilità del modello per miscele nell'intorno dello stechiometrico.

Infine, di seguito si riportano le differenze nei risultati tra simulazioni G-equation e prove sperimentali in termini di picco di pressione raggiunto in camera di combustione e intervallo di durata della combustione tra il 10% e il 90% di frazione di massa bruciata (MFB). Nel complesso si registra una piccola sovrastima del picco di pressione nelle simulazioni numeriche dei casi stechiometrici di miscela idrogeno-metano ($0.25 < HR < 0.75$) e una piccola sottostima negli stessi casi a $\Phi=0.625$; la situazione si ribalta invece per i casi HR 1. Anche qui complessivamente, a pari HR i casi stechiometrici simulati riportano errori relativi inferiori rispetto ai casi magri simulati. Invece per quanto riguarda la durata di combustione, a eccezione del caso HR 1 stechiometrico, tutti i casi simulati stimano tempi di combustione superiori a quelli sperimentali con differenze via via crescenti passando da HR 0.25 a HR 0.75, a prova del fatto che il modello G-equation combinato al

meccanismo chimico C3 fa fatica a tenere il passo delle prove sperimentali per valori crescenti di frazioni in massa di idrogeno nella miscela.

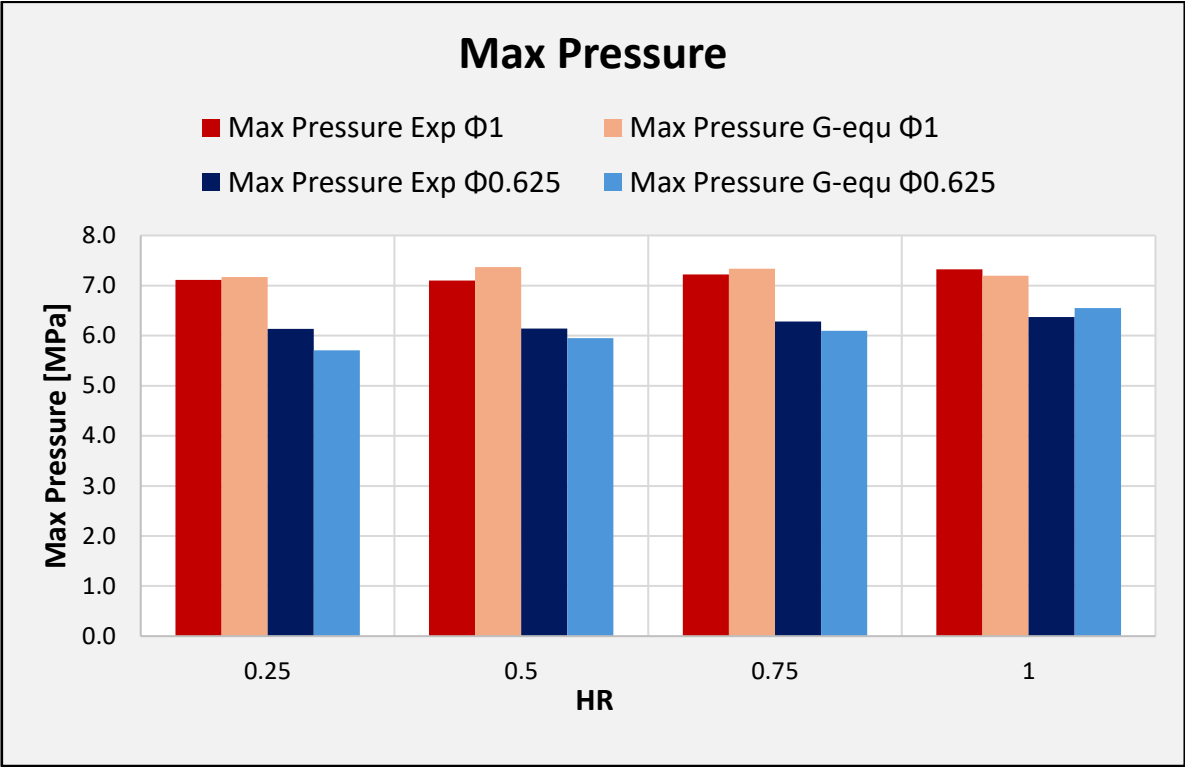


Figura 50: picco pressione sperimentale vs numerico

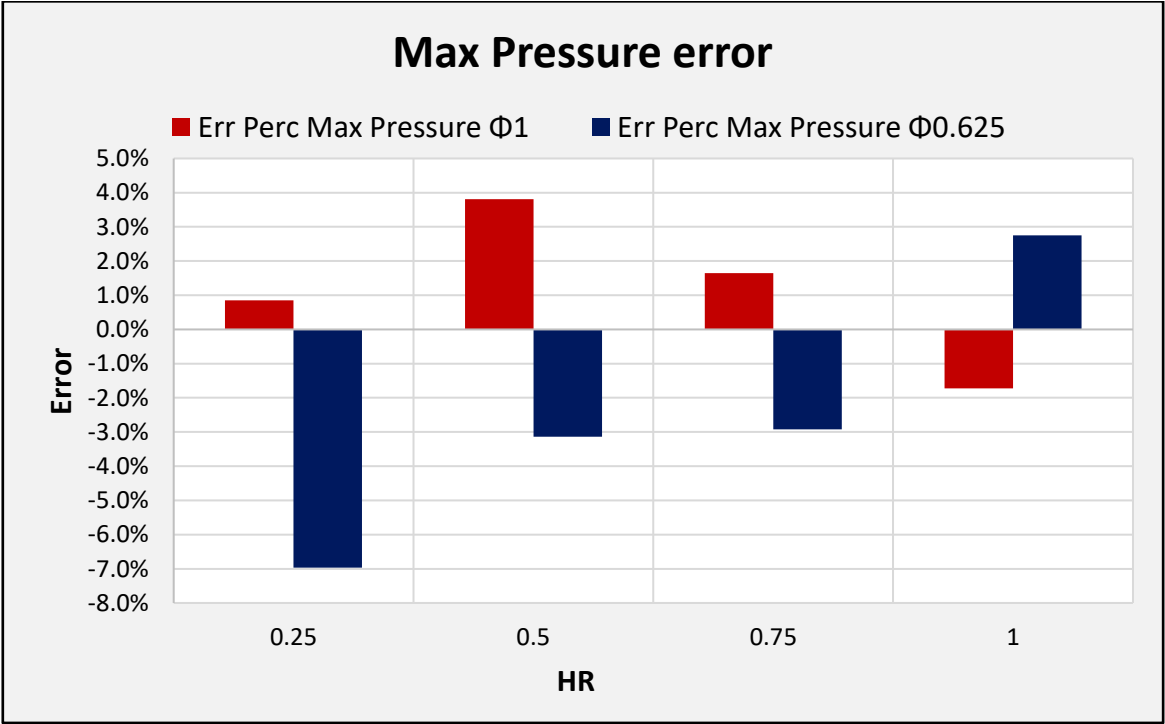


Figura 51: errore relativo picco pressione sperimentale vs numerico

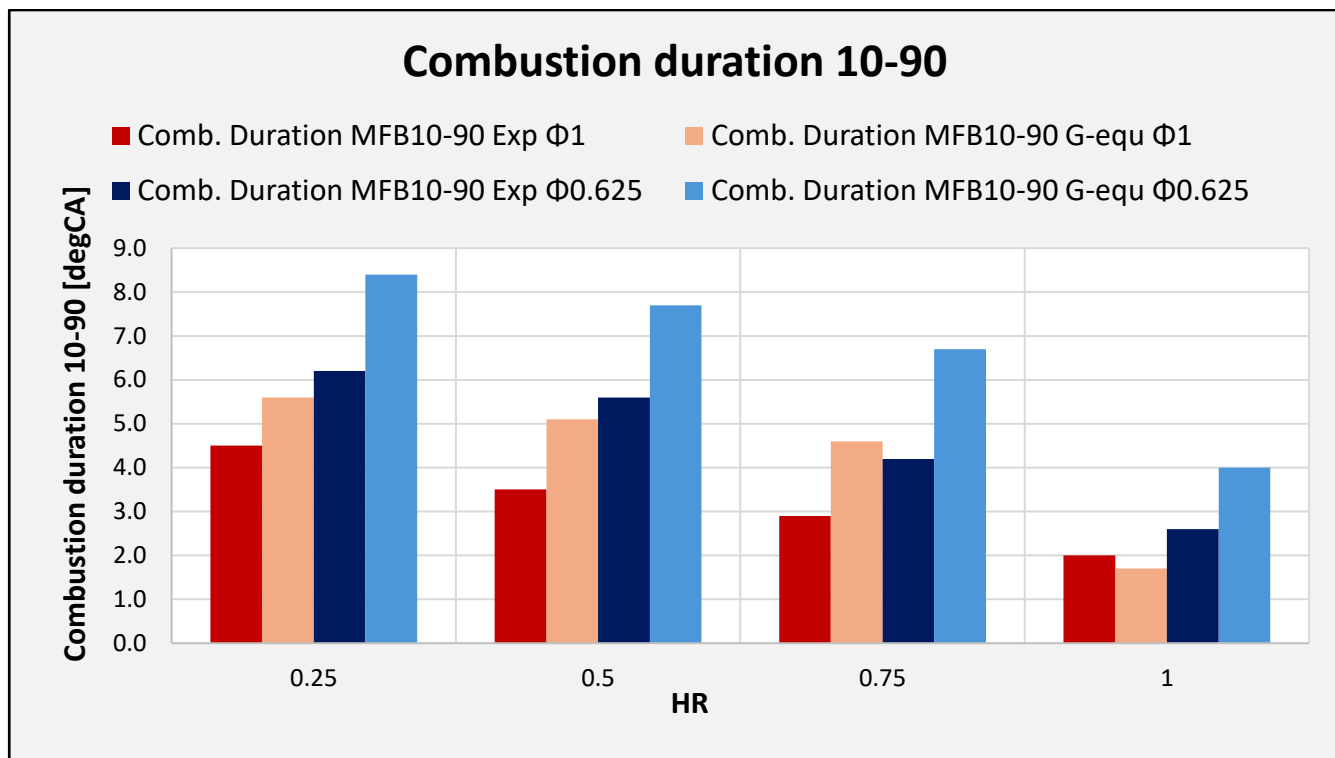


Figura 52: intervallo MFB 10-90 sperimentale vs numerico

7 Conclusioni

Alla luce dei risultati ottenuti, il modello di combustione G-equation si è dimostrato una valida alternativa ai modelli basati sulla risoluzione dettagliata della cinetica chimica all'interno del fronte di fiamma. La sua efficacia risiede principalmente nella maggiore efficienza computazionale e nella buona adattabilità a differenti condizioni operative, che lo rendono particolarmente adatto per simulazioni in cui l'obiettivo è la calibrazione del comportamento globale della combustione piuttosto che lo studio approfondito dei meccanismi reattivi.

Il confronto diretto con un altro modello flamelet, l'ECFM, ha consentito di evidenziare i punti di forza del G-equation, in particolare:

- una migliore coerenza temporale nella fase della combustione nei primi istanti dopo l'accensione;
- una stima realistica degli anticipi di accensione, in linea con i dati sperimentali;
- una buona corrispondenza dei principali parametri motoristici, come l'andamento della pressione in camera e precamera, il profilo del rilascio termico e la frazione di massa bruciata, soprattutto in condizioni stechiometriche con bassa percentuale di idrogeno in miscela.

D'altro canto, è stata riscontrata una minore capacità predittiva del modello G-equation in configurazioni con carica fortemente magra, in particolare per miscele ad alto contenuto di idrogeno. Questo limite può essere attribuito, da un lato, alla minor accuratezza del meccanismo cinetico C3 in condizioni di elevata diluizione e alta reattività, e dall'altro al fatto che i modelli flamelet tradizionali sono stati concepiti per motori convenzionali. La sperimentazione su nuove architetture come i motori a carica ultra-diluita, o l'utilizzo di combustibili alternativi in miscela, solleva nuove sfide per la modellazione della combustione. Tali condizioni esulano dai contesti per cui molti modelli sono stati originariamente sviluppati, rendendo necessaria un'evoluzione e calibrazione dei modelli stessi per ampliarne la validità.

Anche i meccanismi cinetici utilizzati, come GRI-Mech e C3, sono soggetti a continui aggiornamenti nella letteratura scientifica, con l'obiettivo di fornire valori sempre più accurati delle velocità di fiamma laminari, pur mantenendo una formulazione compatibile con la semplificazione richiesta dai modelli CFD.

Una possibile strategia futura per migliorare la predittività del modello numerico potrebbe consistere nello sviluppo di modelli ibridi, in cui si sfruttano i punti di forza dei diversi approcci. Ad esempio, si potrebbe ipotizzare l'impiego del G-equation nella fase iniziale di accensione, per poi transire al modello ECFM durante la fase di propagazione sviluppata, massimizzando così l'efficienza e la fedeltà del calcolo.

In alternativa, qualora si volesse privilegiare l'accuratezza dei risultati rispetto ai costi computazionali, è possibile:

- sostituire il solutore chimico CEQ, utilizzato per modellare i prodotti di combustione, con un modello SAGE, in grado di risolvere la cinetica chimica dettagliata all'interno del fronte di fiamma;

- adottare un modello di turbolenza LES, capace di descrivere in modo più accurato le interazioni tra i fenomeni di trasporto turbolento e la chimica reattiva.

In conclusione, i risultati di questo studio confermano la validità del modello G-equation nel contesto della simulazione della combustione in motori RCEM alimentati a miscele idrogeno-metano, pur evidenziando aree di miglioramento e spunti concreti per estenderne l'applicabilità a scenari più complessi e realistici.

Bibliografia

- [1] ScienceDirect, "*A review on hydrogen blending in gas network: Insight into safety, corrosion, embrittlement, coatings and liners, and bibliometric analysis*", Int. J. Hydrogen Energy, 2024. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0360319924005810>
- [2] Curran, H. J., "*Developing detailed chemical kinetic mechanisms for fuel combustion*", Proc. Combust. Inst., vol. 37, no. 1, pp. 57–81, 2019, DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.054.
- [3] D'Errico, G., Nadim, U., and Marchitto, L., "*Numerical and experimental investigation of combustion processes in a Rapid Compression Expansion Machine (RCEM)*", 2018.
- [4] Di Mare, L., and Allocca, L., "*Pre-chamber ignition systems: Numerical and experimental investigations in alternative-fuel engines*", 2021.
- [5] Dong, S., Wagnon, S. W., Maffei, L. P., Kukkadapu, G., Nobili, A., Mao, Q., Pelucchi, M., Cai, L., Zhang, K., Raju, M., Chatterjee, T., Pitz, W. J., Faravelli, T., Pitsch, H., Senecal, P. K., and Curran, H. J., "*A new detailed kinetic model for surrogate fuels: C3MechV3.3*", Fuel Communications, vol. 7, 2021. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2666352X21000212>
- [6] Ferrari, G., "*Motori a combustione interna*". Milano, Italy: Esculapio, 2020
- [7] Fruzza, F., et al., "*Flashback propensity due to hydrogen blending in natural gas: Sensitivity to operating and geometrical parameters*", 2023.
- [8] International Energy Agency (IEA), "*Global Energy Review 2023*", 2023. <https://www.iea.org/reports/global-energy-review-2023>
- [9] Peters, N., "*Turbulent Combustion*". Cambridge, U.K.: Cambridge University Press, 2000.
- [10] Poinso, T., and Veynante, D., "*Theoretical and Numerical Combustion*", 3rd ed. Philadelphia, PA, USA: Edwards, 2011.
- [11] Ribeiro, T. A., et al., "*A review on pre-chamber ignition systems: Applications and technological challenges*", Renew. Sustain. Energy Rev., 2020.
- [12] Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner, W. C., Jr., Lissianski, V. V., and Qin, Z., "*GRI-Mech: An optimized detailed chemical reaction mechanism for methane combustion*", http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [13] Wired, "*How Clean Is 'Clean' Hydrogen?*", Wired, 2022. <https://www.wired.com/story/how-clean-is-clean-hydrogen>
- [14] Ihme, M., and Pitsch, A., "*A level-set based flamelet model for the prediction of combustion in spark ignition engines*", ResearchGate, https://www.researchgate.net/publication/228970999_A_level_set_based_flamelet_model_for_the_prediction_of_combustion_in_spark_ignition_engines

[15] ACS Energy & Fuels, "*Ignition and Combustion Characterization of Hydrogen/Methane Blends in Direct-Injection Compression-Ignition Conditions*", 2024.
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.energyfuels.3c03725>

Ringraziamenti

Ringrazio tutti i professori che ho incontrato nel mio percorso universitario, che mi hanno formato come uomo ancor prima che come ingegnere.

Ringrazio il professor Baratta e la professoressa Misul per l'opportunità che mi hanno dato nell'assegnarmi questo lavoro di tesi.

Ringrazio Riccardo, a cui auguro il meglio per il futuro, che mi ha seguito per filo e per segno in tutto il mio percorso di tesi.

Ringrazio la mia famiglia, che mi supporta da sempre ed è la mia forza; quello che sono oggi è soprattutto merito vostro; la vostra fiducia per me è motivo di orgoglio ma soprattutto la motivazione che porto dentro per superare ogni ostacolo.

Ringrazio i miei amici, dal primo all'ultimo che ho conosciuto in ordine cronologico; vi ringrazio per quello che fate per me, per la vostra vicinanza nei momenti belli e brutti della vita; ovunque ci porteranno le nostre strade, potrete sempre contare su di me.

Ringrazio la città di Torino, che per me sarà sempre come una seconda casa. Mi porterò dietro tanti ricordi, dal primo giorno in cui sono arrivato tra mille paure ad oggi...e chissà se le nostre strade proseguiranno ancora insieme.