

# Politecnico di Torino

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica

Tesi di Laurea Magistrale

## Validazione numerico-sperimentale del meccanismo di cinetica chimica **ARAMCO** applicato alla combustione di idrogeno e metano in un motore RCEM



**Politecnico  
di Torino**

Sessione di Laurea Luglio 2025

Relatori  
Prof. Mirko Baratta  
Prof.ssa Daniela Misul

Candidato  
Francesco Settembrini

Correlatore  
Riccardo Sola



# Indice

<b>Abstract</b>	<b>i</b>
<b>Elenco delle figure</b>	<b>iii</b>
<b>1 Introduzione</b>	<b>2</b>
1.1 L'idrogeno come innovazione tecnologica . . . . .	2
1.2 La fluidodinamica computazionale . . . . .	4
1.2.1 Importanza della CFD nello sviluppo dei prodotti . . . . .	5
1.2.2 Fasi essenziali di un'analisi CFD . . . . .	5
1.3 RCEM (Rapid Compression Expansion Machine) . . . . .	7
<b>2 Modello di combustione e di turbolenza</b>	<b>10</b>
2.1 Combustione nei motori ad accensione comandata . . . . .	10
2.2 ECFM (Extended Coherent Flamelet Model) . . . . .	11
2.2.1 Equazione di trasporto . . . . .	12
2.2.2 Calcolo della velocità di reazione . . . . .	13
2.3 Modello di turbolenza . . . . .	13
2.3.1 RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) . . . . .	15
2.3.2 Modello $k - \varepsilon$ della turbolenza . . . . .	16
2.3.3 Modello di stretch turbolento . . . . .	16
2.3.4 LFS (Laminar Flame Speed) . . . . .	17
<b>3 Meccanismo di cinetica chimica Aramco</b>	<b>19</b>
3.1 Introduzione . . . . .	19
3.2 Origini e Sviluppo . . . . .	19
3.3 Struttura e Caratteristiche . . . . .	19
3.4 Confronto con altri Meccanismi di Combustione . . . . .	20
3.4.1 Gri-Mech 3.0 . . . . .	20
3.4.2 C3 v3.5 . . . . .	21
<b>4 Layout e setup del modello di simulazione</b>	<b>23</b>
4.1 Definizione Regions . . . . .	23
4.2 Fattori scala della griglia . . . . .	24
<b>5 Risultati simulazioni 1D della velocità di fiamma laminare (LFS)</b>	<b>25</b>
5.1 Analisi sul picco dei valori medi di LFS . . . . .	28
5.2 Andamento LFS in funzione della temperatura . . . . .	32

5.2.1	Risultati caso HR 0.25 . . . . .	32
5.2.2	Risultati caso HR 0.5 . . . . .	35
5.2.3	Risultati caso HR 0.75 . . . . .	38
5.2.4	Risultati caso HR 1 . . . . .	41
5.3	Discussione dei risultati 1D . . . . .	44
<b>6</b>	<b>Risultati simulazioni 3D di combustione con modello Aramco</b>	<b>45</b>
6.1	Risultati caso HR 0.25, $\Phi = 1$ . . . . .	46
6.2	Risultati caso HR 0.25, $\Phi = 0.625$ . . . . .	48
6.3	Risultati caso HR 0.5, $\Phi = 1$ . . . . .	50
6.4	Risultati caso HR 0.5, $\Phi = 0.625$ . . . . .	52
6.5	Risultati caso HR 0.75, $\Phi = 1$ . . . . .	54
6.6	Risultati caso HR 0.75, $\Phi = 0.625$ . . . . .	56
6.7	Risultati caso HR 1, $\Phi = 1$ . . . . .	58
6.8	Risultati caso HR 0.5, $\Phi = 0.625$ . . . . .	60
6.9	Discussione dei risultati 3D . . . . .	62
6.10	Analisi comparativa delle immagini ottiche e simulate . . . . .	64
<b>7</b>	<b>Conclusioni e sviluppi futuri</b>	<b>70</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>72</b>

# Abstract

Nel presente lavoro di tesi viene svolta un'approfondita analisi numerica della combustione in un motore RCEM (Rapid Compression Expansion Machine), alimentato con miscele di idrogeno e metano, mediante simulazioni CFD condotte con il software Converge. Il crescente interesse verso combustibili alternativi a basse emissioni e l'utilizzo dell'idrogeno come vettore energetico sostenibile hanno spinto la comunità scientifica a investigare nuove strategie per la decarbonizzazione dei sistemi propulsivi. In questo contesto, l'RCEM si configura come un banco prova ideale per studiare in modo controllato i fenomeni legati alla combustione rapida, grazie alla sua capacità di replicare le condizioni termodinamiche dei motori a combustione interna mantenendo una geometria semplificata.

Le simulazioni sono state condotte utilizzando una mesh adattativa e modelli dettagliati di cinetica chimica, con particolare attenzione all'effetto della variazione della composizione del combustibile. Sono state analizzate miscele con diverse frazioni molari di idrogeno (0,25 – 0,50 – 0,75 – 1,00), studiando parametri chiave quali la velocità di fiamma laminare, l'andamento della pressione in camera, la distribuzione della temperatura e la formazione dei principali prodotti di combustione.

Un ulteriore contributo del lavoro riguarda il confronto tra i risultati numerici e le osservazioni sperimentali ottenute mediante sensori ottici ad alta velocità installati sul motore RCEM. L'analisi delle immagini ha permesso di validare qualitativamente l'evoluzione del fronte di fiamma simulato, evidenziando una buona coerenza con quanto osservato sperimentalmente, soprattutto in termini di morfologia e tempistica di accensione.

I risultati evidenziano come l'aumento della frazione di idrogeno tenda a intensificare la reattività della miscela, portando a una combustione più rapida e a picchi di pressione più elevati. Ciò conferma l'elevato potenziale dell'idrogeno per applicazioni future nei motori a combustione interna, pur evidenziando la necessità di un controllo accurato del processo combustivo per evitare fenomeni di detonazione o stress meccanici eccessivi sui componenti.



# Elenco delle figure

1.1	Opposed piston engine simulation . . . . .	6
1.2	Diesel engine simulation . . . . .	6
1.3	Esempi di modellazione CFD . . . . .	6
1.4	Schema motore RCEM . . . . .	8
1.5	Schema pre-camera . . . . .	8
1.6	Schema accesso ottico . . . . .	8
1.7	Caratteristiche motore . . . . .	8
1.8	Altre caratteristiche . . . . .	8
1.9	Modello RCEM . . . . .	9
1.10	Pre-chamber modello . . . . .	9
2.1	Fronte di fiamma . . . . .	11
2.2	Confronto dei 3 modelli di turbolenza . . . . .	14
3.1	Blocchi chimici modello C3 v3.5 . . . . .	21
4.1	Tabella Regions . . . . .	23
4.2	Modello RCEM . . . . .	24
4.3	Pre-chamber modello . . . . .	24
5.1	Risultati LFS HR0.5 . . . . .	29
5.2	Risultati LFS HR0.25 . . . . .	29
5.3	Risultati LFS HR0.75 . . . . .	30
5.4	Risultati LFS HR1 . . . . .	30
5.5	Risultati HR0.25, Pressione=2 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	32
5.6	Risultati HR0.25, Pressione=2 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	32
5.7	Risultati HR0.25, Pressione=4 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	33
5.8	Risultati HR0.25, Pressione=4 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	33
5.9	Risultati HR0.25, $\Phi = 1$ . . . . .	34
5.10	Risultati HR0.25, $\Phi = 0.6$ . . . . .	34
5.11	Risultati HR0.5, Pressione=2 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	35
5.12	Risultati HR0.5, Pressione=2 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	35
5.13	Risultati HR0.5, Pressione=4 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	36
5.14	Risultati HR0.5, Pressione=4 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	36
5.15	Risultati HR0.5, $\Phi = 1$ . . . . .	37
5.16	Risultati HR0.5, $\Phi = 0.6$ . . . . .	37
5.17	Risultati HR0.75, Pressione=2 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	38

## ELENCO DELLE FIGURE

---

5.18	Risultati HR0.75, Pressione=2 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	38
5.19	Risultati HR0.75, Pressione=4 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	39
5.20	Risultati HR0.75, Pressione=4 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	39
5.21	Risultati HR0.75, $\Phi = 1$ . . . . .	40
5.22	Risultati HR0.75, $\Phi = 0.6$ . . . . .	40
5.23	Risultati HR1, Pressione=2 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	41
5.24	Risultati HR1, Pressione=2 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	41
5.25	Risultati HR1, Pressione=4 MPa, $\Phi = 1$ . . . . .	42
5.26	Risultati HR1, Pressione=4 MPa, $\Phi = 0.6$ . . . . .	42
5.27	Risultati HR1, $\Phi = 1$ . . . . .	43
5.28	Risultati HR1, $\Phi = 0.6$ . . . . .	43
6.1	Andamento Pressione Cilindro HR0.25, $\Phi = 1$ . . . . .	46
6.2	Andamento Pressione in pre-camera HR0.25, $\Phi = 1$ . . . . .	46
6.3	Apparent Heat Release Rate HR0.25, $\Phi = 1$ . . . . .	47
6.4	Mass Fraction Burned HR0.25, $\Phi = 0.1$ . . . . .	47
6.5	Andamento Pressione Cilindro HR0.25, $\Phi = 0.625$ . . . . .	48
6.6	Andamento Pressione in pre-camera HR0.25, $\Phi = 0.625$ . . . . .	48
6.7	Apparent Heat Release Rate HR0.25, $\Phi = 0.625$ . . . . .	49
6.8	Mass Fraction Burned HR0.25, $\Phi = 0.625$ . . . . .	49
6.9	Andamento Pressione Cilindro HR0.5, $\Phi = 1$ . . . . .	50
6.10	Andamento Pressione in pre-camera HR0.5, $\Phi = 1$ . . . . .	50
6.11	Apparent Heat Release Rate HR0.5, $\Phi = 1$ . . . . .	51
6.12	Mass Fraction Burned HR0.5, $\Phi = 0.1$ . . . . .	51
6.13	Andamento Pressione Cilindro HR0.5, $\Phi = 0.625$ . . . . .	52
6.14	Andamento Pressione in pre-camera HR0.5, $\Phi = 0.625$ . . . . .	52
6.15	Apparent Heat Release Rate HR0.5, $\Phi = 0.625$ . . . . .	53
6.16	Mass Fraction Burned HR0.5, $\Phi = 0.625$ . . . . .	53
6.17	Andamento Pressione Cilindro HR0.75, $\Phi = 1$ . . . . .	54
6.18	Andamento Pressione in pre-camera HR0.75, $\Phi = 1$ . . . . .	54
6.19	Apparent Heat Release Rate HR0.75, $\Phi = 1$ . . . . .	55
6.20	Mass Fraction Burned HR0.75, $\Phi = 0.1$ . . . . .	55
6.21	Andamento Pressione Cilindro HR0.75, $\Phi = 0.625$ . . . . .	56
6.22	Andamento Pressione in pre-camera HR0.75, $\Phi = 0.625$ . . . . .	56
6.23	Apparent Heat Release Rate HR0.75, $\Phi = 0.625$ . . . . .	57
6.24	Mass Fraction Burned HR0.75, $\Phi = 0.625$ . . . . .	57
6.25	Andamento Pressione Cilindro HR1, $\Phi = 1$ . . . . .	58
6.26	Andamento Pressione in pre-camera HR1, $\Phi = 1$ . . . . .	58
6.27	Apparent Heat Release Rate HR1, $\Phi = 1$ . . . . .	59
6.28	Mass Fraction Burned HR1, $\Phi = 0.1$ . . . . .	59
6.29	Andamento Pressione Cilindro HR1, $\Phi = 0.625$ . . . . .	60
6.30	Andamento Pressione in pre-camera HR1, $\Phi = 0.625$ . . . . .	60
6.31	Apparent Heat Release Rate HR1, $\Phi = 0.625$ . . . . .	61
6.32	Mass Fraction Burned HR1, $\Phi = 0.625$ . . . . .	61
6.33	Analisi comparativa HR1, $\Phi = 0.625$ . . . . .	65
6.34	Analisi comparativa HR1, $\Phi = 0.625$ . . . . .	65

## ELENCO DELLE FIGURE

---

6.35	Analisi comparativa HR0.75, $\Phi = 1$ . . . . .	66
6.36	Analisi comparativa HR0.75, $\Phi = 0.625$ . . . . .	66
6.37	Analisi comparativa HR0.5, $\Phi = 1$ . . . . .	67
6.38	Analisi comparativa HR0.5, $\Phi = 0.625$ . . . . .	67
6.39	Analisi comparativa HR0.25, $\Phi = 1$ . . . . .	68
6.40	Analisi comparativa HR0.25, $\Phi = 0.625$ . . . . .	68

# 1 Introduzione

## 1.1 L'idrogeno come innovazione tecnologica

Nel corso degli anni, i motori a combustione interna hanno svolto un ruolo cruciale nell'economia globale, ma i problemi ambientali legati a questi sistemi sono sempre più evidenti. Dall'inquinamento atmosferico alle emissioni di CO<sub>2</sub>, l'impatto negativo sulla nostra salute e sul clima è innegabile. Tuttavia, oggi più che mai, stiamo assistendo a una crescente consapevolezza dell'importanza di cercare soluzioni sostenibili, e una di queste si sta affermando con sempre più forza: l'idrogeno.

Nel panorama della mobilità sostenibile, l'idrogeno si posiziona come un vettore energetico chiave per il superamento dei combustibili fossili e la riduzione dell'impatto ambientale. Tra le sue molteplici applicazioni, i motori a combustione interna alimentati a idrogeno rappresentano una tecnologia certamente non inedita, ma tornata in voga negli ultimi tempi.

I motori a combustione interna, alimentati principalmente da carburanti fossili, sono tra le principali fonti di inquinamento atmosferico e di gas serra. Le emissioni di CO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, e particolato contribuiscono al riscaldamento globale e all'aumento dell'inquinamento atmosferico, con effetti negativi sulla salute pubblica, sulla qualità dell'aria e sull'ambiente. L'aumento dei trasporti, l'industrializzazione e la dipendenza dai combustibili fossili hanno solo amplificato questi problemi.

Il cambiamento climatico è una delle sfide più urgenti del nostro tempo, e l'aumento delle temperature globali ha portato a eventi estremi sempre più frequenti: siccità, ondate di calore, inondazioni e perdita di biodiversità. Per contrastare questo scenario, è essenziale ridurre drasticamente le emissioni di CO<sub>2</sub> e passare a fonti di energia pulite e rinnovabili.

Le soluzioni tradizionali, come i veicoli elettrici alimentati da batterie, rappresentano passi importanti, ma permangono alcune sfide, come la produzione e il riciclaggio delle batterie stesse e la necessità di un'infrastruttura capillare di ricarica.

L'idrogeno emerge oggi come una delle soluzioni più promettenti per affrontare le problematiche legate ai motori a combustione interna e alle emissioni di CO<sub>2</sub>. L'idrogeno può essere prodotto da fonti rinnovabili come il sole e il vento, rendendolo una risorsa praticamente illimitata e priva di emissioni dirette.

Un motore a idrogeno, dal punto di vista esterno, ha un aspetto e un funzionamento simili a quelli di un tradizionale propulsore a benzina.[1] Entrambi operano seguendo lo stesso ciclo termodinamico e presentano componenti analoghi. Questa somiglianza offre un notevole vantaggio in termini di produzione e adattabilità,

poiché consente di abbattere i costi di riconversione e di sfruttare l'affidabilità già testata dei motori a combustione interna.

Uno degli aspetti più interessanti dell'idrogeno come carburante è la sua elevata densità energetica, che gli permette di immagazzinare e liberare grandi quantità di energia rispetto al suo peso. Grazie a questa caratteristica, i motori alimentati a idrogeno risultano più efficienti rispetto a quelli a benzina o diesel, riuscendo a generare la stessa potenza con un minor consumo di combustibile.[2]

Tuttavia, l'utilizzo dell'idrogeno nei motori termici presenta anche alcune criticità. Tra le principali problematiche si segnalano:

- la carenza di infrastrutture per il rifornimento
- l'inefficienza dei metodi attuali di produzione dell'idrogeno
- le sfide legate alla sicurezza

Uno degli ostacoli principali alla diffusione su larga scala dei motori a idrogeno è la scarsità di punti di rifornimento. La creazione di un'infrastruttura adeguata richiede ingenti investimenti in termini economici e di tempo, rappresentando una barriera significativa all'adozione di questa tecnologia.

Inoltre, il processo di produzione dell'idrogeno attualmente in uso è poco efficiente e spesso dipende ancora dai combustibili fossili, riducendo i benefici ambientali derivanti dal suo utilizzo.

Tuttavia, l'innovazione nel campo della produzione da fonti rinnovabili, come l'elettrolisi dell'acqua alimentata da energia pulita, sta facendo progressi significativi. Se queste tecnologie continueranno a evolversi rapidamente, potranno contribuire a rendere l'idrogeno una soluzione davvero sostenibile nel medio-lungo termine.

Anche la sicurezza rappresenta un aspetto critico. L'idrogeno è un gas altamente infiammabile, caratteristica che condivide con combustibili come il metano e il GPL. Per garantirne un utilizzo sicuro, sono necessarie misure rigorose per lo stoccaggio e il trasporto. Essendo più leggero dell'aria e molto volatile, richiede sistemi di gestione avanzati, differenti da quelli adottati per altri gas, che in alcuni casi possono presentare rischi anche superiori.

## 1.2 La fluidodinamica computazionale

La fluidodinamica computazionale, o CFD, è una disciplina che utilizza metodi numerici per analizzare il comportamento dei fluidi e i fenomeni fisici ad essi associati, come scambi termici, trasferimenti di materia e reazioni chimiche o fisiche tra diverse sostanze. Questo approccio consente di simulare processi complessi e rappresenta un potente strumento per la progettazione e l'ottimizzazione di sistemi fluidodinamici in diversi ambiti industriali.[3]

Fino agli anni Settanta, lo studio della fluidodinamica era prevalentemente teorico, poiché la risoluzione analitica o numerica delle equazioni che governano questi fenomeni fisici risultava impraticabile. Con l'evoluzione delle capacità di calcolo, la fluidodinamica si è divisa in due approcci paralleli: la fluidodinamica classica, basata su metodi analitici, e la fluidodinamica numerica, focalizzata sulla risoluzione computazionale dei problemi derivanti dalla fluidodinamica classica. L'adozione della CFD ha permesso di superare molte delle limitazioni della sperimentazione tradizionale, fornendo uno strumento versatile per la simulazione virtuale dei flussi fluidi.

Alla base della CFD vi sono modelli matematici ed equazioni che necessitano di essere risolti per ottenere risultati attendibili. Le equazioni fondamentali della fluidodinamica, note come equazioni di Navier-Stokes, descrivono il movimento dei fluidi e sono equazioni differenziali non lineari che possono essere risolte analiticamente solo in casi semplici, come flussi laminari o geometrie regolari.[4] Per ottenere soluzioni numeriche approssimate, le equazioni vengono discretizzate in forma algebrica, consentendo di risolverle mediante l'uso di computer ad alte prestazioni (HPC - High Performance Computing). Il dominio di studio viene suddiviso in una griglia di piccole celle, in modo simile all'analisi agli elementi finiti (FEA), all'interno delle quali le equazioni sono calcolate iterativamente per ottenere una rappresentazione accurata del flusso.

L'evoluzione della CFD ha portato allo sviluppo di modelli sempre più sofisticati per descrivere fenomeni avanzati, tra cui la turbolenza, i fluidi multifase, le interazioni fluido-struttura e i meccanismi di scambio termico. Grazie a queste innovazioni, la CFD si è affermata come uno strumento essenziale per ingegneri e progettisti, permettendo di simulare il comportamento di sistemi complessi prima della loro realizzazione fisica. Questo si traduce in una significativa riduzione dei tempi e dei costi di sviluppo, oltre a rendere possibili studi su configurazioni progettuali che sarebbero difficilmente affrontabili con metodi sperimentali tradizionali.

Un altro grande vantaggio della CFD è l'indipendenza dal fattore di scala, che consente di eliminare problemi legati alla visualizzazione dei parametri fluidodinamici nelle simulazioni su prototipi reali. Inoltre, la possibilità di parametrizzare diverse configurazioni iniziali, sia in termini di geometrie che di condizioni al contorno, permette di valutare l'impatto delle variabili operative sul comportamento del sistema analizzato.

Poiché i modelli CFD sono approssimazioni della realtà fisica, è fondamentale validare i risultati numerici confrontandoli con dati sperimentali per garantire l'affidabilità delle simulazioni. L'accuratezza delle soluzioni numeriche dipende dalla qualità delle discretizzazioni adottate e dalla scelta degli algoritmi numerici impiegati

per risolvere le equazioni governanti.

Oggi, la CFD rappresenta una delle principali applicazioni del calcolo ad alte prestazioni ed è ampiamente utilizzata in settori come l'aeronautica, l'automotive, il settore motoristico, l'elettronica, lo spazio, la nautica, l'energia, l'ambiente e la bioingegneria. Grazie alla sua capacità di fornire analisi dettagliate e affidabili, la fluidodinamica computazionale continua a evolversi, contribuendo al progresso tecnologico e scientifico in molteplici ambiti applicativi.

### 1.2.1 Importanza della CFD nello sviluppo dei prodotti

L'uso della CFD è fondamentale nella progettazione di componenti e sistemi in cui la gestione dei fluidi e del calore è un aspetto critico. Attraverso software specializzati, è possibile studiare e ottimizzare le prestazioni di un progetto, analizzando parametri chiave come:

- Dinamica del flusso, per comprendere come il fluido si muove all'interno o all'esterno di un determinato sistema;
- Distribuzione termica, per valutare il trasferimento di calore e individuare eventuali criticità;
- Andamento della pressione, utile per prevedere eventuali picchi che potrebbero compromettere il funzionamento del sistema;
- Struttura dei vortici, che fornisce informazioni sulla formazione e sull'evoluzione di moti turbolenti.

### 1.2.2 Fasi essenziali di un'analisi CFD

Per eseguire una simulazione CFD efficace, si seguono diversi passaggi fondamentali:

#### 1. Creazione del modello digitale

Prima di avviare la simulazione, è necessario disporre di una rappresentazione tridimensionale del componente o dell'ambiente da analizzare. Questa geometria può essere realizzata all'interno di un software CAD o importata da altri strumenti di progettazione.

#### 2. Definizione del dominio fluido

In questa fase si stabilisce l'area occupata dal fluido, che può essere confinata (ad esempio, un liquido che scorre all'interno di una tubatura) o esterna (come il vento che agisce sulla carrozzeria di un veicolo). Vengono quindi assegnate le proprietà fisiche del fluido, come densità, viscosità, conducibilità termica e capacità termica specifica.

#### 3. Impostazione delle condizioni al contorno

Le condizioni al contorno descrivono come il fluido interagisce con l'ambiente circostante. I parametri più importanti includono:

- Velocità o pressione alle superfici di ingresso e uscita del dominio;

- Portata volumetrica o massica, nel caso di flussi confinati;
- Effetti rotazionali, nel caso di componenti in movimento;
- Condizioni termiche, come temperature imposte, scambi di calore per convezione o irraggiamento.

#### 4. Esecuzione della simulazione

Il modello può essere analizzato in condizioni stazionarie, per valutare lo stato di equilibrio del sistema, o in condizioni transitorie, per osservare come si evolvono le variabili nel tempo.

#### 5. Analisi e visualizzazione dei risultati

Una volta completata la simulazione, i dati ottenuti possono essere esplorati attraverso mappe di colore, linee di flusso, tracciati vettoriali o rappresentazioni in 3D. I risultati possono essere esaminati:

- In punti specifici del modello;
- Analizzando valori massimi e minimi su determinate superfici;
- Considerando l'intero volume del fluido per un quadro generale del comportamento dinamico.

#### 6. Ottimizzazione del progetto

Grazie alla CFD, è possibile apportare modifiche in tempo reale al progetto, migliorando le prestazioni del sistema con un processo iterativo che riduce la necessità di prototipi fisici e test sperimentali.

Per semplificare l'interpretazione dei dati e accelerare l'analisi, si possono utilizzare piani di sezione che consentono di esaminare dettagli specifici all'interno del dominio fluido. Questo approccio aiuta a comprendere meglio le dinamiche del sistema e a individuare eventuali aree critiche che necessitano di ulteriori interventi di ottimizzazione.

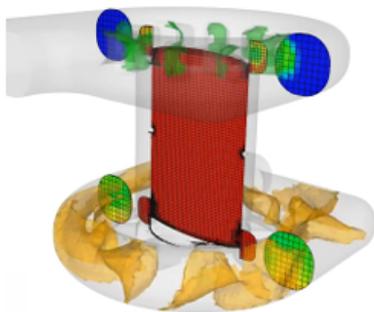


Figura 1.1: Opposed piston engine simulation

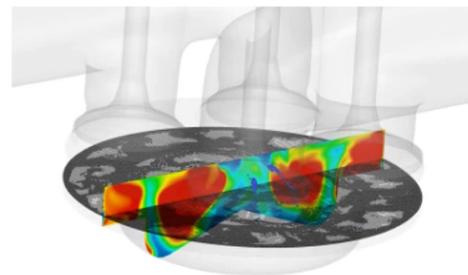


Figura 1.2: Diesel engine simulation

Figura 1.3: Esempi di modellazione CFD

### 1.3 RCEM (Rapid Compression Expansion Machine)

Per approfondire la ricerca sull'idrogeno, gli ingegneri utilizzano la Rapid Compression Expansion Machine (RCEM), una sofisticata apparecchiatura progettata per l'analisi approfondita dei processi di combustione nei motori termici. Questo dispositivo permette di studiare l'intero ciclo di combustione in condizioni di pressione e temperatura controllate. La macchina è dotata di un pistone mobile che si sposta all'interno di un cilindro, il cui movimento è gestito elettronicamente e pneumaticamente per simulare un singolo ciclo di combustione.

Oltre a regolare il movimento del pistone, l'RCEM consente anche di controllare l'iniezione del combustibile a diverse pressioni, sia alte che basse, e l'accensione della miscela. Il processo di combustione viene monitorato da sensori di pressione dinamici ad alta risoluzione, installati nella camera di combustione.

Un aspetto particolarmente innovativo di questo sistema è la presenza di quattro accessi ottici: tre laterali e uno coassiale con il pistone. Questi accessi permettono di eseguire analisi avanzate sul comportamento della combustione, incluso il ritardo nell'accensione e l'evoluzione del fronte di fiamma. Grazie all'impiego di telecamere ad alta velocità, è possibile effettuare misure di chemiluminescenza (per l'analisi della combustione) e osservare la luminosità retroilluminata (per studiare i moti dello spray di combustibile).

La capacità di controllare con precisione la composizione, la temperatura e la pressione della miscela combustibile consente di eseguire cicli di analisi estremamente ripetibili, un fattore cruciale per lo studio della combustione dell'idrogeno, dei combustibili sintetici e dei biocombustibili.

In figura 1.4 è descritto l'apparato sperimentale [5] che comprende:

- un serbatoio di premiscelazione;
- un dispositivo di accensione;
- un circuito di controllo;
- diversi sensori;
- un sistema di acquisizione dati.

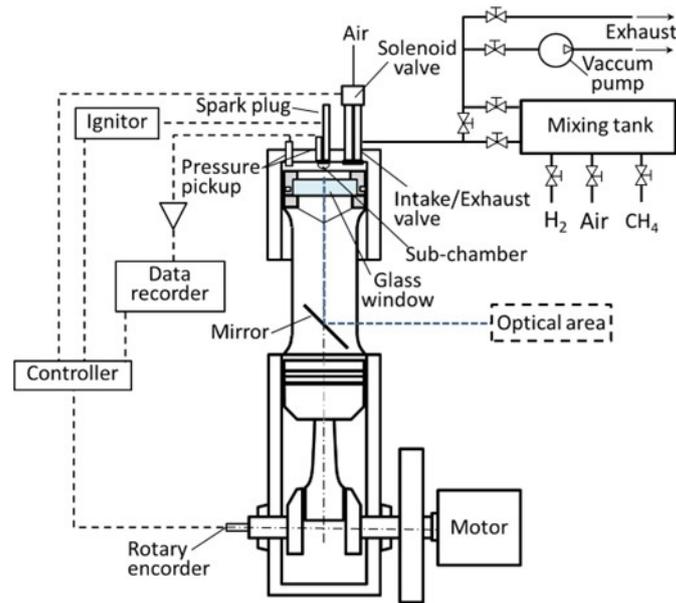


Figura 1.4: Schema motore RCEM

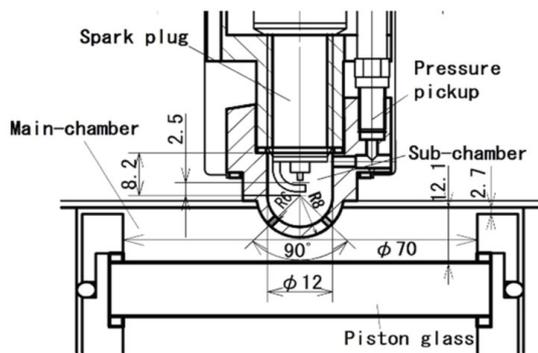


Figura 1.5: Schema pre-camera

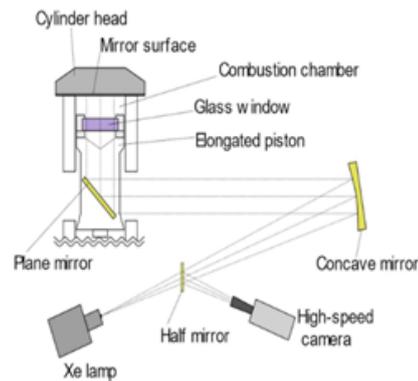


Figura 1.6: Schema accesso ottico

Dalle tabelle sperimentali è possibile poi osservare le principali caratteristiche tecniche del motore, tra cui alesaggio, corsa, velocità di rotazione e timing di iniezione.

Nel setup sperimentale, metano, idrogeno e aria compressa vengono miscelati all'interno del serbatoio di premiscelazione prima di essere aspirati nel motore.

Experimental conditions	
Engine speed	900 rpm
Valve closing temperature	358 K
Initial pressure	0.14 MPa
Ignition timing	-10 °AIDC
Excess air ratio	1, 1.6
Hydrogen ratio by energy	0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0

Figura 1.7: Caratteristiche motore

RCEM specification	
Bore/Stroke	102/105 mm
Compression ratio	13.9

Figura 1.8: Altre caratteristiche

Per il mio progetto di tesi, ho utilizzato un modello CAD del motore RCEM, implementato in un ambiente CFD attraverso l'uso del software Converge Studio. Dalle immagini, si può osservare il modello monocilindrico dell'RCEM, caratterizzato da una precamera di combustione nella sezione della testa, dotata di tre fori di collegamento con la camera principale. È inoltre visibile un componente cilindrico, parte integrante del sistema di accesso ottico del motore.

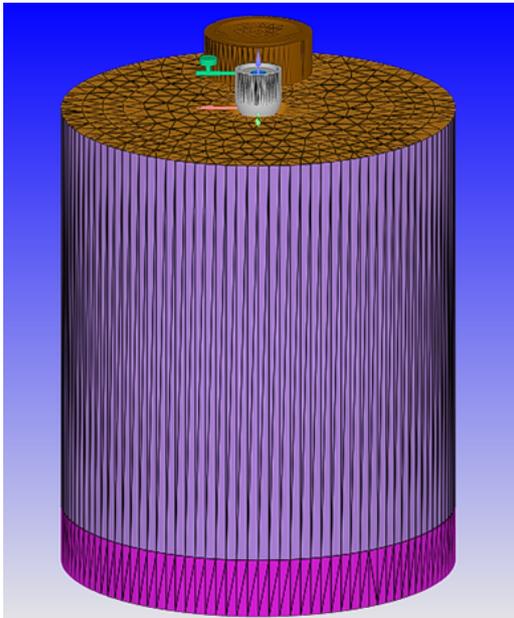


Figura 1.9: Modello RCEM

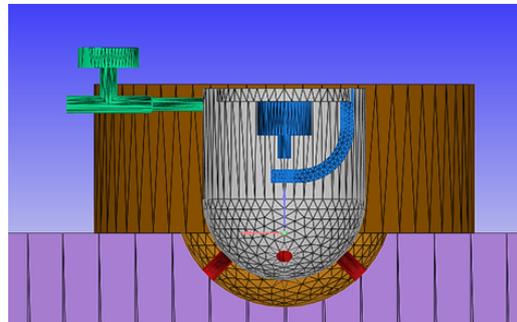


Figura 1.10: Pre-chamber modello

## 2 Modello di combustione e di turbolenza

### 2.1 Combustione nei motori ad accensione comandata

Utilizzando combustibili con ritardi di accensione relativamente elevati, ovvero con bassa reattività, come benzina, metanolo, etanolo, gas naturale, GPL, il combustibile, premiscelato con l'aria comburente all'esterno del cilindro, può essere compresso senza che questo dia luogo a reazioni di combustione, come invece avviene nei motori a compressione.

Il processo di combustione deve essere avviato dall'esterno, ad esempio tramite una scintilla elettrica come nel nostro caso, in grado di portare una piccola porzione di miscela a temperature maggiori di 1000 K: da questo primo nucleo di innesco la combustione si propaga via via al resto della carica in condizioni di regime turbolento, in particolare il primo nucleo di gas combusti trasmette calore con un meccanismo di scambio termico convettivo allo strato di miscela adiacente, innalzandone la temperatura facendo sì che anche in questo strato avvengano le reazioni di ossidazione con la successiva liberazione di energia termica e così via.

Un parametro importante da tenere in considerazione è il rapporto aria/combustibile, poiché la combustione può avvenire impiegando quantitativi di aria comburente differenti dallo stechiometrico, dove per stechiometrico si intende un rapporto aria/combustibile pari a 1.

In particolare con una miscela ricca si ottiene una combustione con eccesso di combustibile rispetto al comburente, mentre con miscela povera si ottiene una combustione con eccesso di aria.

La propagazione del processo di combustione all'interno della camera di combustione non potrebbe avvenire con le velocità caratteristiche di una fiamma laminare (numero di Reynolds basso), il quale risulta di 2 ordini di grandezza in meno rispetto alle velocità necessarie al processo.

E' per questo motivo che la velocità del fronte di fiamma è incrementata dal fenomeno della turbolenza. I moti all'interno della camera, che possono essere di diverso tipo, rendono la superficie del fronte di fiamma frastagliata, moltiplicando l'area di superficie del fronte, che assume la forma di una sottile lamina corrugata e ripiegata su se stessa più volte, con una geometria di tipo frattale.

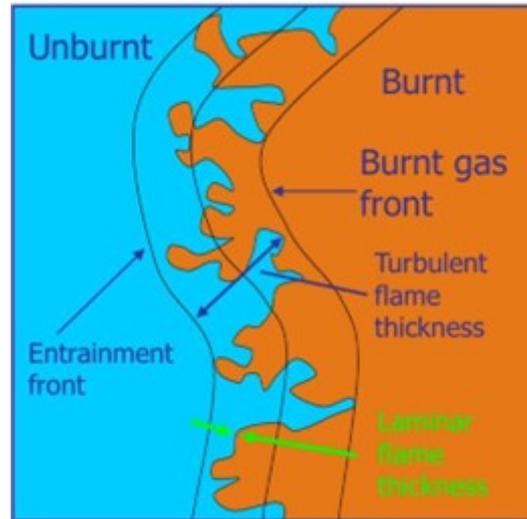


Figura 2.1: Fronte di fiamma

## 2.2 ECFM (Extended Coherent Flamelet Model)

L'Extended Coherent Flamelet Model (ECFM) si basa sul trasporto della densità superficiale di fiamma ( $\Sigma$ ), consentendo la simulazione della propagazione della fiamma nei motori ad accensione comandata, oltre a prevedere l'autoaccensione e la formazione di inquinanti anche in condizioni di elevata stratificazione.

Per rappresentare sia i fenomeni di miscelazione sia la diffusione della fiamma (DF – Flame Diffusion), ogni cella computazionale è suddivisa in tre regioni distinte: una contenente solo combustibile, una con aria pura (inclusa la presenza di gas di ricircolo, EGR) e una zona mista.

ECFM si sviluppa a partire dal modello CFM (Coherent Flamelet Model) [6] e si basa sul principio che la fiamma turbolenta sia costituita da una serie di piccoli elementi (flamelets) che si comportano come fiamme laminari. Nell'ipotesi del regime di flamelets, le reazioni chimiche avvengono così rapidamente da poter suddividere il flusso in due componenti: la miscela fresca e i gas combusti. Questi due elementi sono separati da uno strato sottile, che può essere immaginato come formato da piccoli segmenti aventi il ruolo di fiamme laminari.

Un flusso turbolento e premiscelato viene classificato come in regime di flamelet quando una linea ideale collega un qualsiasi punto A (situato all'interno della miscela di gas incombusti) a un punto B (posto nei prodotti della combustione), attraversando almeno un fronte di fiamma attivo. [7]

L'interazione tra la turbolenza e questi piccoli segmenti di fiamma può dare origine al cosiddetto effetto di spegnimento (quenching effect). Questo fenomeno si verifica quando perturbazioni esterne, come dispersione di calore o stiramenti aerodinamici, sono talmente intense da ridurre la velocità della reazione fino a renderla trascurabile o, in alcuni casi, da arrestare del tutto il processo di combustione. I flamelets vengono considerati solo in assenza di tale effetto, poiché, se presente, una parte della miscela fresca si mescola con i gas combusti senza reagire, complicando notevolmente la descrizione del flusso reagente.

Per calcolare la densità superficiale della fiamma, il modello utilizza il rapporto di equivalenza (carburante/aria) della carica fresca, la composizione (inclusi eventuali gas residui) e la temperatura nelle vicinanze della fiamma. Questo valore viene poi impiegato per rappresentare su larga scala la distribuzione tra zone combusti e non combusti.

### 2.2.1 Equazione di trasporto

All'interno di ogni cella della mesh, il modello suddivide lo spazio in tre regioni distinte: una contenente solo carburante, una con sola aria pulita e una zona di miscelazione tra le due. In quest'ultima, la frazione in massa di ciascuna specie ( $Y_i$ ) viene determinata per descrivere il rapporto tra aria e combustibile. La combustione può avvenire esclusivamente nella zona di miscelazione, poiché nelle altre due regioni non è presente la miscela necessaria per la reazione.

L'equazione di trasporto per la densità della superficie di fiamma  $\Sigma$  risulta:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial u_i \Sigma}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \left( \frac{\Sigma}{\rho} \right)}{\partial x_i} \right) + (A_{tsgs} + A_{tres} + C_{urvsgs}) \Sigma - D + P_k \quad (2.1)$$

dove:

- $\mu$  è la viscosità molecolare,
- $\rho$  rappresenta la densità media tra gas combusti e incombusti,
- $Sc$  è il numero di Schmidt,
- $A_{tsgs}$ ,  $A_{tres}$  e  $C_{urvsgs}$  sono termini sorgente che derivano rispettivamente dalla turbolenza, dall'espansione media del fluido e dalla curvatura,
- $P_k$  è il termine sorgente associato alla scintilla di accensione,
- $D$  rappresenta il termine dissipativo dovuto al consumo dei reagenti.

Particolare importanza assume il termine  $A_{tsgs}$  descritto nella seguente formula:

$$A_{tsgs} = \alpha \frac{3}{\sqrt{55}} Ka \frac{S_L^0}{\delta_L} \left[ 1 - \exp \left( -\frac{3}{2} C_k \frac{1}{Re_t} \left( \frac{\pi l_t}{\delta_c} \right)^{4/3} \right) \right]^{1/2} \quad (2.2)$$

Nello specifico il parametro  $\alpha$  presente nell'equazione è responsabile della calibrazione del modello, e serve per adattare la simulazione ai dati sperimentali. Il valore di  $\alpha$  può rallentare o accelerare il tasso di combustione, a seconda del modello di flame stretch utilizzato per chiudere l'equazione della superficie di fiamma.

Dal punto di vista teorico, la capacità predittiva del modello ECFM, accoppiato a un determinato modello di flame stretch, si valuta analizzando come varia il parametro  $\alpha$  al variare delle condizioni operative o della composizione della miscela. Se  $\alpha$  rimane pressoché costante, è possibile considerare il modello predittivo.

In questo caso studio, il parametro  $\alpha$  è stato calibrato in coerenza con le impostazioni adottate per gli altri meccanismi di cinetica chimica, al fine di garantire la confrontabilità dei risultati ottenuti

Maggiori dettagli si trovano nel capitolo *Combustion Modeling: Extended Coherent Flame Model* di Convergent Science (2024).

### 2.2.2 Calcolo della velocità di reazione

Una volta nota la densità della superficie di fiamma  $\Sigma$ , si può determinare la velocità di reazione mediante la seguente relazione:

$$\dot{\omega} = \rho \Sigma S_L Y_{f,u} \quad (2.3)$$

dove  $Y_{f,u}$  rappresenta la frazione in massa di combustibile nella miscela non ancora bruciata e  $S_L$  è la velocità di fiamma laminare.

La densità superficiale di fiamma  $[1/m]$  misura le circonvoluzioni del fronte di fiamma. Un valore di densità superficiale di fiamma elevato implica un'alta velocità di reazione turbolenta.

## 2.3 Modello di turbolenza

Il comportamento dei fluidi in movimento può essere classificato in due tipi principali di flusso: laminare e turbolento. Il flusso laminare è caratterizzato da un andamento regolare e uniforme, in cui gli strati di fluido scorrono parallelamente senza interferire tra loro, evitando la formazione di vortici o mescolamenti trasversali. Questo tipo di flusso si manifesta quando la viscosità è abbastanza elevata da smorzare eventuali perturbazioni, che potrebbero essere causate da irregolarità superficiali o altre fonti di disturbo. I flussi laminari sono generalmente associati a valori bassi o medi del numero di Reynolds.

Al contrario, il flusso turbolento è dominato da variazioni irregolari e caotiche di velocità e pressione, distribuite sia nello spazio che nel tempo. Queste fluttuazioni nascono da instabilità che, attraverso interazioni non lineari, danno origine a vortici di dimensioni sempre più piccole, fino alla loro dissipazione in calore a causa della viscosità. Questo tipo di regime è tipico di fluidi con numeri di Reynolds elevati.

Nei processi di combustione, il flusso turbolento svolge un ruolo chiave, essendo fortemente condizionato dalla fase di aspirazione e, successivamente, dalla fase di compressione. La turbolenza influisce sulla propagazione della fiamma e sulla sua struttura, rendendo essenziale comprenderne le dinamiche per una modellazione accurata. La descrizione di questi fenomeni richiede di considerare l'interazione tra reazione chimica, diffusione di massa, conduzione termica e movimento del fluido.

Per studiare la combustione in condizioni turbolente e risolvere le equazioni del moto, si possono adottare tre strategie principali: il metodo Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS), la Large Eddy Simulation (LES) e la Direct Numerical Simulation (DNS). Ogni approccio presenta vantaggi e limitazioni [8].

- **DNS (Direct Numerical Simulation)**: questa tecnica risolve direttamente le equazioni di Navier-Stokes senza l'impiego di modelli di turbolenza, catturando ogni dettaglio delle interazioni tra il flusso e la combustione. È un metodo estremamente accurato, ma richiede risorse computazionali molto elevate, rendendolo difficilmente applicabile a scenari ingegneristici su larga scala.
- **LES (Large Eddy Simulation)**: questa metodologia distingue i vortici turbolenti in base alle loro dimensioni. I più grandi vengono risolti direttamente dal solutore fluidodinamico, mentre quelli più piccoli, al di sotto di una soglia critica, sono modellati tramite un approccio di sub-grid per tener conto del loro effetto sulla combustione. In generale quindi pur essendo un metodo abbastanza accurato, risulta ancora costoso a livello computazionale e meno stabile e molto sensibile, il che lo rende sfavorevole a studi di ingegneria a design rapido.
- **RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)**: in questo metodo, le variabili del flusso vengono mediate su un certo intervallo temporale, riducendo così la complessità del problema. Sebbene offra un'ottima efficienza computazionale, la sua accuratezza dipende dal modello di turbolenza utilizzato per descrivere le fluttuazioni non risolte, e la sua stabilità garantisce degli ottimi risultati.

In questa tesi, l'attenzione sarà focalizzata esclusivamente sull'approccio RANS, in quanto è quello adottato per la parte sperimentale del lavoro. L'impiego della modellazione numerica RANS è giustificata in quanto le condizioni stabili create dai cicli motorizzati precedenti all'accensione minimizzano la variabilità ciclo per ciclo, garantendo coerenza sia nei dati sperimentali sia nella loro riproduzione numerica.

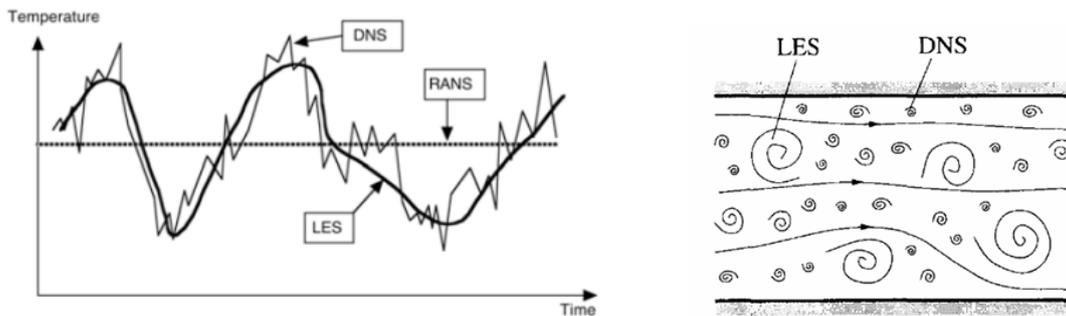


Figura 2.2: Confronto dei 3 modelli di turbolenza

### 2.3.1 RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)

Negli approcci basati sulla media di Reynolds per la turbolenza, tutte le instabilità vengono eliminate attraverso la media, ovvero tutta l'instabilità viene considerata parte della turbolenza. Durante il processo di media, la non linearità delle equazioni di Navier-Stokes dà origine a termini che devono essere modellati.

La complessità della turbolenza rende improbabile che un singolo modello basato sulla media di Reynolds possa rappresentare tutti i flussi turbolenti, quindi i modelli di turbolenza dovrebbero essere considerati approssimazioni ingegneristiche piuttosto che leggi scientifiche.

Richiamando il principio della decomposizione di Reynolds, in un flusso statisticamente stazionario, ogni variabile può essere scritta come la somma di un valore medio nel tempo e di una fluttuazione attorno a quel valore:

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

$$\text{where } \bar{\phi}(x_i) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \phi(x_i, t) dt$$

dove  $t$  rappresenta il tempo e  $T$  l'intervallo di media. Questo intervallo deve essere grande rispetto alla scala temporale tipica delle fluttuazioni; quindi, siamo interessati al limite per  $T \rightarrow \infty$ .

Se  $T$  è sufficientemente grande, né  $\bar{\phi}$  dipende dal momento in cui si inizia la mediazione.

Se il flusso è instazionario, la media nel tempo non può essere utilizzata e deve essere sostituita dalla media d'insieme:

$$\bar{\phi}(x_i, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi(x_i, t)$$

$$\text{and } \tilde{\phi}(x_i, t) = \frac{\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \rho(x_i, t) \phi(x_i, t)}{\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \rho(x_i, t)}$$

dove  $N$  deve essere sufficientemente grande da eliminare gli effetti delle fluttuazioni. Questo tipo di media può essere applicato a qualsiasi flusso.

Applicando la media di Reynolds alle equazioni di Navier-Stokes si ottengono le equazioni di Navier-Stokes mediate di Reynolds (RANS). Il termine RANS viene utilizzato per indicare uno qualsiasi di questi processi di mediazione. Dall'equazione si deduce che la media di una fluttuazione è pari a zero. Pertanto, la media di qualsiasi termine lineare nelle equazioni di conservazione dà semplicemente lo stesso termine per la quantità mediata. Invece, quando si tratta di un termine non lineare quadratico, si ottengono due componenti: uno è il prodotto delle medie e l'altro è una covarianza.

$$\overline{u_i \phi} = \overline{(\bar{u}_i + u'_i) (\bar{\phi} + \phi')} = \bar{u}_i \bar{\phi} + \overline{u'_i \phi'}.$$

L'ultimo termine è nullo solo se le due quantità non sono correlate; tuttavia, questo è raro nei flussi turbolenti. Di conseguenza, le equazioni di conservazione contengono termini come  $u_i u_j$  (sforzi di Reynolds) e  $u_i \phi_i$  (flusso turbolento di quantità scalare). Questi termini non possono essere rappresentati unicamente in funzione delle quantità medie.

La presenza degli sforzi di Reynolds e del flusso turbolento di quantità scalare all'interno delle leggi di conservazione significa che queste ultime contengono più variabili di quante siano le equazioni. Affinché le equazioni possano essere considerate chiuse, sono necessarie alcune approssimazioni, che solitamente consistono nel scrivere le quantità sopra citate in termini delle quantità medie. Queste approssimazioni vengono chiamate modelli di turbolenza.

### 2.3.2 Modello $k - \varepsilon$ della turbolenza

Il modello  $k - \varepsilon$  è stato un punto di riferimento per la modellazione della turbolenza nella CFD. Esso contiene cinque parametri con i seguenti valori comuni:

$$C_\mu = 0.09, \quad C_{\varepsilon_1} = 1.44, \quad C_{\varepsilon_2} = 1.92, \quad \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\varepsilon = 1.3 \quad (2.4)$$

L'implementazione di questo modello in un codice di simulazione è relativamente semplice. Le equazioni RANS hanno la stessa forma delle equazioni laminari, a condizione che la viscosità molecolare,  $\mu$ , venga sostituita dalla viscosità effettiva:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (2.5)$$

Dove  $\mu_t$  è la viscosità turbolenta.

La rigidità è la ragione per cui le equazioni del flusso medio e della turbolenza vengono trattate separatamente nel metodo descritto; accoppiare le equazioni renderebbe molto difficile ottenere la convergenza. Per questo motivo, è necessario utilizzare un metodo di under-relaxation per questi parametri, con valori tipicamente tra 0.6 e 0.8.

### 2.3.3 Modello di stretch turbolento

Il modello utilizzato per questo lavoro sul software CONVERGE è il modello ITNFS (The Intermittent Turbulent Net Flame Stretch). Questo modello mostra come la turbolenza intermittente influenzi la distribuzione dello stiramento stesso lungo il fronte di fiamma. Il modello ITNFS è una libreria dello stretch di fiamma costruito da Meneveau e Poinot [9] ed è ancora oggi ampiamente utilizzato.

Successivamente, altri modelli sono stati proposti da Charlette e Bougrine per migliorare le prestazioni nella predizione di fiamme instabili, includendo anche l'effetto del numero di Lewis nella formulazione della funzione di efficienza.

Lo stretch turbolento in questione ( $K_t$ ) è dato dalla relazione:

$$\frac{K_t}{\epsilon/k} = ITNFS_{factor} \cdot f\left(\frac{u' \cdot L}{S_L \cdot \delta_L}\right) \quad (2.6)$$

dove  $S_L$  è la velocità di fiamma laminare, e  $L$  è la scala di lunghezza integrale. Inoltre,  $k$  è l'energia cinetica turbolenta,  $u' = \sqrt{\frac{2k}{3}}$  è la radice quadrata media della velocità di fluttuazione turbolenta,  $S_L$  è la velocità di fiamma laminare e  $\delta_L$  è lo spessore della fiamma laminare.

### 2.3.4 LFS (Laminar Flame Speed)

Uno degli elementi chiave nei modelli di combustione è la velocità di propagazione della fiamma laminare (LFS, *Laminar Flame Speed*). La fiamma si genera attraverso una reazione chimica autosufficiente che si sviluppa in una specifica area dello spazio nota come fronte di fiamma. Questa zona si suddivide in due parti principali: la regione di preriscaldamento e la regione di reazione.

Nella regione di preriscaldamento, la miscela incombusta viene riscaldata principalmente per conduzione termica dalla zona di reazione. In questa fase, non si verificano trasformazioni chimiche significative né rilascio di energia. La regione di reazione, invece, è il punto in cui hanno inizio le reazioni chimiche esotermiche, portando i gas combustibili a raggiungere il loro equilibrio termico.

La velocità di fiamma laminare è una caratteristica intrinseca della miscela di combustibile e indica la velocità con cui la fiamma avanza all'interno di una miscela premiscelata non ancora combusta, posizionata oltre il fronte di fiamma. Questo parametro può essere calcolato con la formula:

$$S_L = \frac{dm_b}{dt} \cdot \frac{1}{A_f \cdot \rho_u} \quad (2.7)$$

dove:

- $\frac{dm_b}{dt}$  rappresenta il tasso di variazione della massa bruciata, determinato dall'incremento di pressione nel cilindro,
- $A_f$  è l'area della fiamma,
- $\rho_u$  indica la densità della miscela incombusta.

Ci sono differenti modi per poter calcolare la velocità di fiamma laminare, tra cui i due metodi di Metghalchi e Keck [10] e Gulder [11].

Un altro metodo impiegato per calcolare la velocità di fiamma laminare di un combustibile generico, utilizzato nel lavoro pratico di questa tesi, si basa sull'uso di tabelle di dati fornite dall'utente. Queste tabelle devono riportare la velocità di fiamma laminare come funzione della frazione di miscela, della temperatura, della pressione e della frazione di diluizione. Prima di eseguire una simulazione di combustione, è possibile generare una tabella di velocità della fiamma laminare (`tlf_table.h5`) utilizzando l'utilità di chimica unidimensionale.

Per calcolare la velocità di fiamma laminare per la combustione del metano, è disponibile la correlazione di Rahim et al. (2002). La velocità della fiamma laminare viene calcolata come:

$$S_L = S_{L0} \cdot \left(1 + \alpha \cdot (T - T_0) + \beta \cdot \left(\frac{P}{P_0} - 1\right)\right) \cdot \left(1 - \Phi_u \cdot \frac{a_l}{a_u}\right) \quad (2.8)$$

dove:

- $S_{L0}$  è la velocità di fiamma laminare di riferimento,
- $T$  è la temperatura,
- $P$  è la pressione,
- $\Phi_u$  è la frazione di miscela,
- $a_l$  e  $a_u$  sono i parametri di diluizione,
- $\alpha$  e  $\beta$  sono coefficienti empirici.

I valori di riferimento sono:

- $T_{u,0} = 298\text{K}$ ,
- $P_0 = 101325\text{Pa}$ ,
- $S_{L0} = 0.7077\text{m/s}$ .

I coefficienti del modello sono dati da:

- $a = 1.39$ ,
- $\beta = -0.016$ ,
- $a_1 = 0.237$ ,
- $a_2 = -3.411$ .

# 3 Meccanismo di cinetica chimica Aramco

## 3.1 Introduzione

Per descrivere accuratamente i processi di combustione in un RCEM, è necessario adottare meccanismi cinetici dettagliati che includano un gran numero di specie chimiche e reazioni.

Uno dei meccanismi di cinetica chimica più avanzati e utilizzati in questo ambito è il *meccanismo di combustione Aramco*, sviluppato da Saudi Aramco per la simulazione della combustione di idrocarburi. Questo meccanismo fornisce un quadro dettagliato delle reazioni chimiche coinvolte, consentendo previsioni affidabili sul comportamento della fiamma, sulle emissioni e sull'efficienza del processo di combustione.

L'obiettivo di questo capitolo è fornire una panoramica del meccanismo Aramco, descrivendone le caratteristiche principali e la sua implementazione nelle simulazioni di combustione in un motore RCEM.

## 3.2 Origini e Sviluppo

Il meccanismo di cinetica chimica Aramco è stato sviluppato da Saudi Aramco, una delle maggiori compagnie petrolifere al mondo, con l'obiettivo di fornire un meccanismo dettagliato per la simulazione della combustione di idrocarburi leggeri come metano, etano e miscele idrogeno-metano. Il meccanismo si basa su un'estesa ricerca sperimentale e computazionale, includendo dati provenienti da studi cinetici di laboratorio e simulazioni CFD avanzate.

Negli ultimi anni, Aramco è stato costantemente aggiornato e migliorato grazie a collaborazioni con istituti di ricerca e università di prestigio. La sua affidabilità lo ha reso uno dei riferimenti principali per la simulazione della combustione in motori a combustione interna, turbine a gas e dispositivi di post-trattamento delle emissioni.

## 3.3 Struttura e Caratteristiche

Il meccanismo Aramco si distingue per la sua elevata complessità e precisione, includendo:

- Un ampio set di specie chimiche, che consente di descrivere con accuratezza le fasi intermedie della combustione.
- Un numero elevato di reazioni chimiche, permettendo una modellazione dettagliata della cinetica di ossidazione.
- Dipendenza dai parametri termodinamici, come temperatura, pressione e composizione della miscela.

Il database del meccanismo di cinetica chimica comprende reazioni di ossidazione dell'idrogeno e degli idrocarburi leggeri, con meccanismi dettagliati per la formazione di specie inquinanti come monossido di carbonio (CO), ossidi di azoto (NO<sub>x</sub>) e idrocarburi incombusti.

### 3.4 Confronto con altri Meccanismi di Combustione

Rispetto ad altri meccanismi di cinetica chimica, come GRI-Mech, C3 v.3.5, LLNL e POLIMI, il meccanismo Aramco presenta le seguenti caratteristiche distintive:

- Maggiore accuratezza nella simulazione della combustione di idrogeno e miscele ibride.
- Ampio range di condizioni operative, con capacità di simulare ambienti ad alta pressione e temperatura.
- Aggiornamenti costanti basati su dati sperimentali recenti.

Queste caratteristiche lo rendono particolarmente adatto per studi sulla combustione avanzata, comprese le applicazioni in motori RCEM, dove la cinetica chimica dettagliata gioca un ruolo cruciale nell'analisi del fenomeno combustivo.

Nei capitoli successivi verrà approfondita l'implementazione del meccanismo di combustione Aramco all'interno di *Converge Studio*, evidenziando i parametri utilizzati e confrontando i risultati con altri due meccanismi di cinetica chimica, Gri-Mech 3.0 e C3 v.3.5.

#### 3.4.1 Gri-Mech 3.0

GRI-Mech 3.0 è un meccanismo ottimizzato progettato per modellare la combustione del gas naturale, inclusa la formazione di NO e la chimica della ricombustione.[12]

Il processo di ottimizzazione del modello è progettato per fornire una solida cinetica di base che fornisca anche la migliore prevedibilità di modellazione combinata delle proprietà di combustione di base. Sono stati apportati miglioramenti nelle categorie di aggiornamento della cinetica con recenti risultati della letteratura, inclusi alcuni nuovi e migliorati esperimenti target per l'ottimizzazione, espandendo il meccanismo e la selezione target ed esaminando la sensibilità alla termodinamica. Sono state apportate due aggiunte principali al meccanismo cinetico, con l'aggiunta

di 4 specie. L'acetaldeide e la chimica vinoxy sono incluse per descrivere meglio l'ossidazione dell'etilene.

Poiché il gas naturale contiene propano (e alcuni idrocarburi superiori che possono essere approssimativamente rappresentati dal propano), è incluso un set minimo di cinetica del propano per modellare questa specie, solo come costituente minore. Altre nuove aggiunte di target includono una serie di osservazioni di tubi d'urto sensibili all'ossidazione dell'intermedio di formaldeide; un set di esperimenti di tubi d'urto, fiamme a bassa pressione e reattori a flusso riguardanti la formazione e la ricombustione tempestive di NO; e alcuni target riguardanti l'accorciamento dei ritardi di accensione dei tubi d'urto del metano mediante piccole quantità di propano o etano. I set di ritardi di accensione dei tubi d'urto e velocità di fiamma laminari sono stati rivisti ed espansi.

Il nuovo meccanismo contiene 325 reazioni (3 sono duplicati perché è richiesta la somma di due espressioni di parametri di velocità) e 53 specie (incluso l'argon). L'ottimizzazione finale a 77 target ha alterato 31 parametri di velocità.

### 3.4.2 C3 v3.5

C3MechV3.3 è stato sviluppato basandosi sul concetto di libreria di componenti, inizialmente proposto da Narayanaswamy et al.[13] e implementato per molti anni da diversi gruppi di ricerca. Come mostrato in Fig. 3.1, partendo da un modello di base comune, è possibile aggiungere diversi blocchi chimici, come paraffine normali e iso, aromatici, biocarburanti (alcoli, DME e biodiesel) ed emissioni (modelli per NO<sub>x</sub>, SO<sub>x</sub>, aldeidi), per formulare un modello dettagliato.[14]

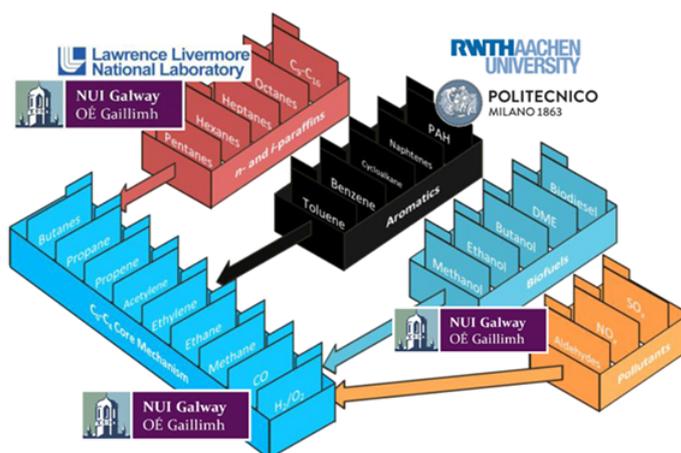


Figura 3.1: Blocchi chimici modello C3 v3.5

Quando si accoppiano sottoinsiemi cinetici sviluppati originariamente con basi chimiche differenti, emergono diverse problematiche tecniche. Per evitare problemi di fusione dei meccanismi, all'inizio del primo anno tutti i gruppi hanno adottato il meccanismo di base in fase di sviluppo da NUIG come riferimento chimico comune e hanno ri-validato tutti gli obiettivi corrispondenti. Di conseguenza, tutti i gruppi hanno utilizzato la stessa base chimica nello sviluppo e nella raffinazione del modello.

Alla fine del primo anno, i più recenti modelli cinetici di tutti i gruppi sono stati fusi insieme.

Oltre alle prestazioni del modello, l'integrazione di tutti i sottoinsiemi cinetici ha richiesto diversi passaggi iterativi a causa di conflitti nella definizione delle specie (ad esempio, descrizione di isomeri aggregata vs. dettagliata) e di descrizioni incoerenti dei percorsi chimici. Questa operazione si è rivelata particolarmente complessa per il sottoinsieme degli aromatici. Pertanto, sono state effettuate delle operazioni per risolvere i conflitti e ottenere un'integrazione fluida dei sottoinsiemi cinetici.

Attualmente, il meccanismo C3 completo è composto da 3761 specie e 16.522 reazioni. Utilizzando la lista delle specie del componente carburante n-eptano, è stato estratto un sotto-meccanismo contenente 1762 specie e 7297 reazioni.

La seconda fase della riduzione del meccanismo viene eseguita partendo dal sotto-meccanismo ottenuto. Per stimare il risparmio di tempo computazionale derivante dall'utilizzo di un sotto-meccanismo estratto rispetto al meccanismo C3 completo, è stato confrontato il tempo di calcolo delle simulazioni di reattori omogenei zero-dimensionali con entrambi i meccanismi. Si è osservato che, in media:

- Il meccanismo C3 completo impiega circa 310 secondi per una singola simulazione di reattore.
- Il sotto-meccanismo estratto (1762 specie) impiega circa 80 secondi per la stessa simulazione.

Ciò dimostra che l'utilizzo di un sotto-meccanismo estratto comporta un notevole risparmio computazionale.

Successivamente, è stato generato un meccanismo ridotto per l'n-eptano, a partire dal sotto-meccanismo estratto, con una tolleranza di errore del 20% nelle previsioni del tempo di accensione (IDT) alle condizioni operative tipiche. Il risultato è stato un meccanismo ridotto con 259 specie e 1532 reazioni, più adatto per l'utilizzo nelle simulazioni CFD.

# 4 Layout e setup del modello di simulazione

## 4.1 Definizione Regions

Una corretta definizione del layout geometrico è fondamentale per ottenere simulazioni accurate in Converge Studio. La suddivisione del modello in diverse regioni e la definizione di una griglia di scala personalizzata permettono di catturare con maggiore precisione i fenomeni fisici chiave, come la propagazione della fiamma.

Il modello geometrico è suddiviso in diverse regioni, ognuna delle quali rappresenta una parte fisica specifica del motore RCEM. Questa suddivisione è essenziale per applicare condizioni al contorno appropriate e monitorare i fenomeni locali.

Nelle figure successive, la suddivisione del modello in base alle regioni è chiaramente visibile, con ciascun componente associato a un colore specifico, facilitando così un'immediata identificazione delle varie aree.

ID	Color	Name	Region Name
0		Not Assigned	Region Undefined
1	WAL-F	Head	CYLINDER
2	WAL-F	Liner	CYLINDER
3	WAL-F	Piston	CYLINDER
4	WAL-F	Pre-Chamber	PRE-CHAMBER
5	WAL-F	Spark	PRE-CHAMBER
6	WAL-F	Nozzles	NOZZLES
7	WAL-F	Pressure Pickup	PRE-CHAMBER
8	WAL-F	Valve Camber	CYLINDER
9	WAL-F	Crevice_Piston	CREVICE

Figura 4.1: Tabella Regions

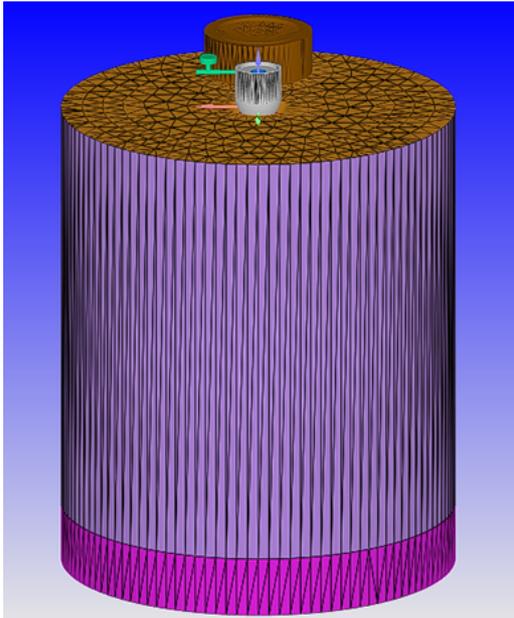


Figura 4.2: Modello RCEM

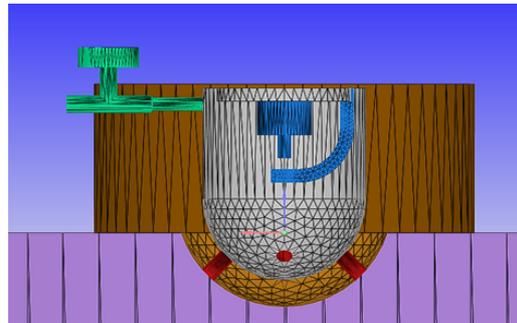


Figura 4.3: Pre-chamber modello

## 4.2 Fattori scala della griglia

Per ottenere risultati di simulazione accurati, è stato applicato un fattore di scala della griglia differenziato per ciascuna regione. La griglia di base ha una risoluzione di 0.0064 metri in tutte le direzioni spaziali. Le regioni che richiedono maggiore precisione, come la zona di accensione e il nozzle, sono state discretizzate con una maglia più fine.

Tabella 4.1: Fattore di scala della griglia

Component	Scale Factor
Pre-chamber	4
Nozzle	5
Crevice	5
Kernel_Ref1	6
Kernel_Ref2	5
Flame Cone	5
Flame Cone ref_2	4
Liner	4
Piston	4
Head	4
Valve	4
Nozzle_Cylinder	6

# 5 Risultati simulazioni 1D della velocità di fiamma laminare (LFS)

Il primo passo di questa tesi è stato l'ottenimento delle tabelle contenenti le velocità di fiamma laminari del combustibile per miscele di idrogeno e metano con diverse proporzioni in massa. In particolare, sono stati analizzati i seguenti casi:

- 50% idrogeno – 50% metano (HR 0.5)
- 25% idrogeno – 75% metano (HR 0.25)
- 75% idrogeno – 25% metano (HR 0.75)
- 100% idrogeno (HR 1)

Per generare tali tabelle, è stato necessario definire opportuni valori di temperatura, pressione e rapporto di equivalenza, adottando i seguenti intervalli di discretizzazione:

## Pressione

- Min: 1.400.000 Pa
- Max: 9.000.000 Pa
- Passo: 100.000 Pa

## Temperatura

- Min: 600 K
- Max: 1400 K
- Passo: 100 K

## Rapporto di Equivalenza

- Min: 0.5
- Max: 1.2
- Passo: 0.1

Gli intervalli scelti sono stati definiti considerando i valori tipici delle condizioni operative di un motore ad accensione comandata alimentato con la miscela in esame. Inoltre, si è prestata particolare attenzione a non ampliare eccessivamente i range, al fine di evitare una quantità eccessiva di dati superflui da simulare.

Si è considerata una composizione dell'aria in camera di combustione assumendo una miscela costituita per il 79% da azoto e per il 21% da ossigeno. Infine sono state prese in considerazione pressioni di 2Mpa e 4Mpa, pressioni che rappresentano le condizioni tipiche di innesco della combustione in motori a combustione interna.

Nel presente lavoro sono state condotte simulazioni per due diverse condizioni di rapporto di equivalenza:  $\phi = 1.0$  (miscela stechiometrica) e  $\phi = 0.6$  (miscela magra). Non sono invece state considerate condizioni ricche, ovvero con  $\phi > 1.0$ . Tale scelta è stata motivata da una serie di considerazioni di natura sia fisica che applicativa.

In primo luogo, l'idrogeno possiede una temperatura di fiamma molto elevata anche in condizioni stechiometriche. Un ulteriore arricchimento della miscela comporterebbe un incremento ancora maggiore della temperatura di combustione, con conseguente aumento significativo della formazione di ossidi di azoto (NOx), già particolarmente critica nei motori a idrogeno. Inoltre, miscele ricche risultano più reattive e possono dare luogo a fenomeni indesiderati come preaccensione o detonazione, specialmente in configurazioni ad alta compressione come quella del motore RCEM.

Dal punto di vista operativo, l'impiego di miscele ricche nei motori a idrogeno è generalmente evitato. I moderni approcci alla combustione con questo tipo di combustibile mirano piuttosto a sfruttare le sue caratteristiche favorevoli (ampio intervallo di infiammabilità e alta velocità di propagazione della fiamma) in condizioni stechiometriche o magre, dove si possono ottenere buoni livelli di efficienza termica con emissioni contenute. Le condizioni ricche, al contrario, risultano poco rappresentative delle reali modalità di esercizio di un motore a idrogeno, specie in ambito automobilistico o per la generazione distribuita di energia.

Infine, da un punto di vista numerico e modellistico, le simulazioni in condizioni ricche sono tendenzialmente più complesse. Le alte temperature possono introdurre instabilità nei modelli termochimici e peggiorare la convergenza numerica, mentre i modelli di combustione utilizzati potrebbero non essere adeguatamente calibrati per descrivere con precisione la combustione dell'idrogeno in eccesso di combustibile.

Sulla base di queste considerazioni, si è scelto di limitare l'analisi a condizioni operative stechiometriche e magre, più realistiche e significative per le applicazioni ingegneristiche del motore in esame.

## CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

---

Una volta completate le simulazioni 1D, i risultati sono stati estratti e analizzati utilizzando Microsoft Excel. Successivamente, sono stati confrontati con i dati sperimentali bibliografici e i dati relativi a due modelli precedentemente citati: GRI-Mech e C3 v.3.5, al fine di valutarne l'accuratezza e la coerenza.

Dai grafici si osserva che, a causa dell'elevata complessità computazionale delle simulazioni, che richiedevano diversi giorni per essere completate, si è deciso di restringere l'intervallo di temperatura tra 600 e 1400 K. Questo intervallo è stato ritenuto sufficiente per analizzare l'andamento e la validità delle simulazioni, poiché comprende il range di sviluppo del fronte di fiamma.

## 5.1 Analisi sul picco dei valori medi di LFS

In questo capitolo si analizza preliminarmente l'andamento della velocità di fiamma laminare in funzione del rapporto di equivalenza  $\phi$  per diverse miscele binarie di idrogeno e metano. L'obiettivo è comprendere come la variazione della composizione influenzi le caratteristiche della propagazione della fiamma, considerando sia gli effetti chimico-cinetici sia quelli legati alla diffusività dei reagenti.

Le simulazioni sono state condotte a tre diverse temperature iniziali — 800 K, 1000 K e 1300 K — selezionate in quanto rappresentative delle condizioni tipiche di inizio combustione. I grafici risultanti mostrano i profili di velocità di fiamma laminare al variare di  $\phi$  per ciascuna temperatura e composizione della miscela, permettendo di valutare l'influenza combinata dei due parametri principali: rapporto di equivalenza e contenuto di idrogeno.

L'analisi si concentra in particolare sull'identificazione delle condizioni in cui si registra la massima velocità di fiamma laminare e sulla relazione tra tale punto e la composizione della miscela combustibile.

# CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

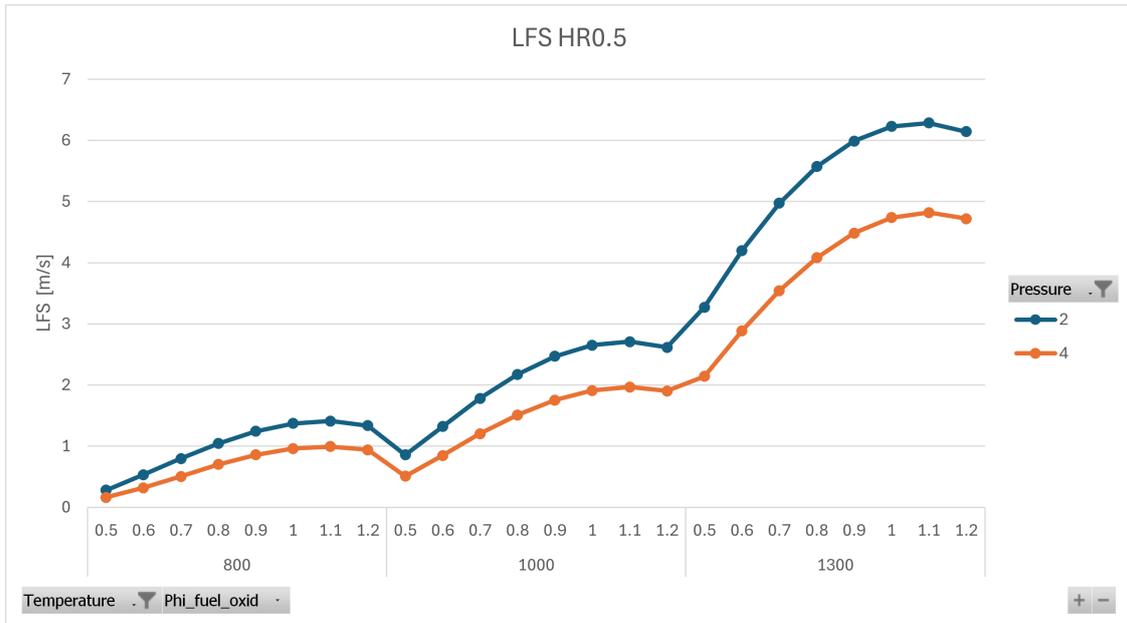


Figura 5.1: Risultati LFS HR0.5

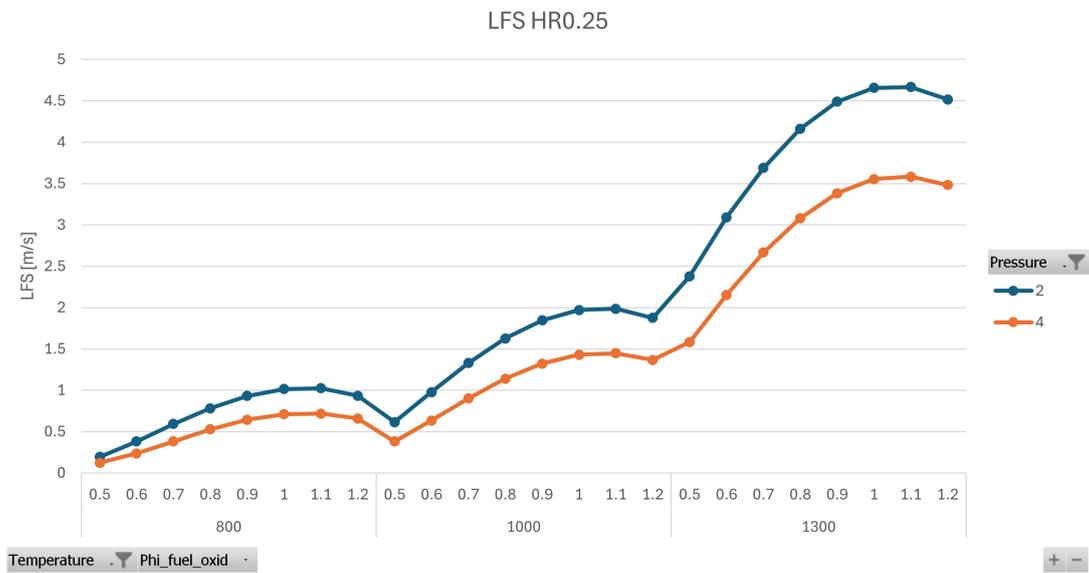


Figura 5.2: Risultati LFS HR0.25

# CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

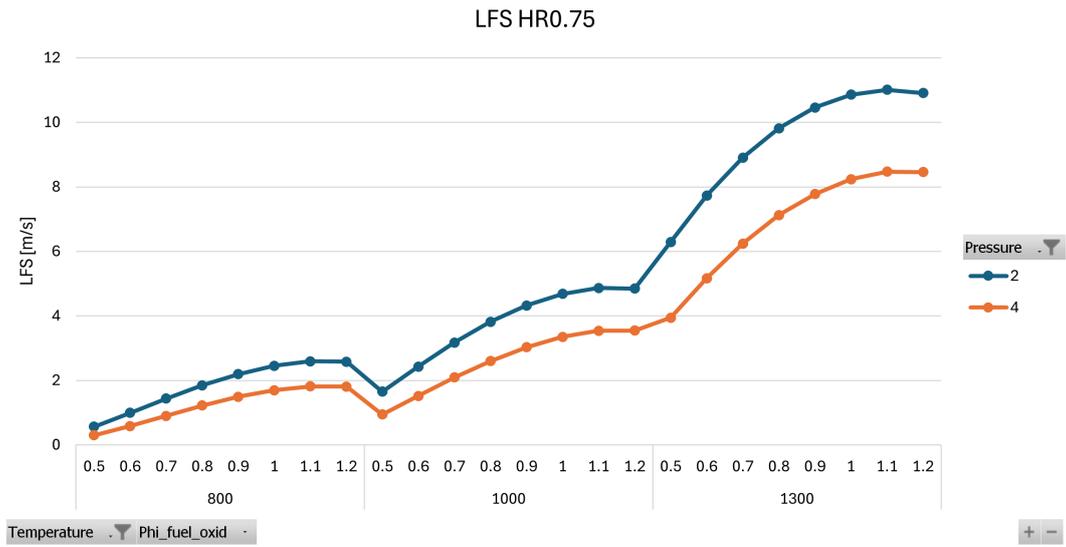


Figura 5.3: Risultati LFS HR0.75

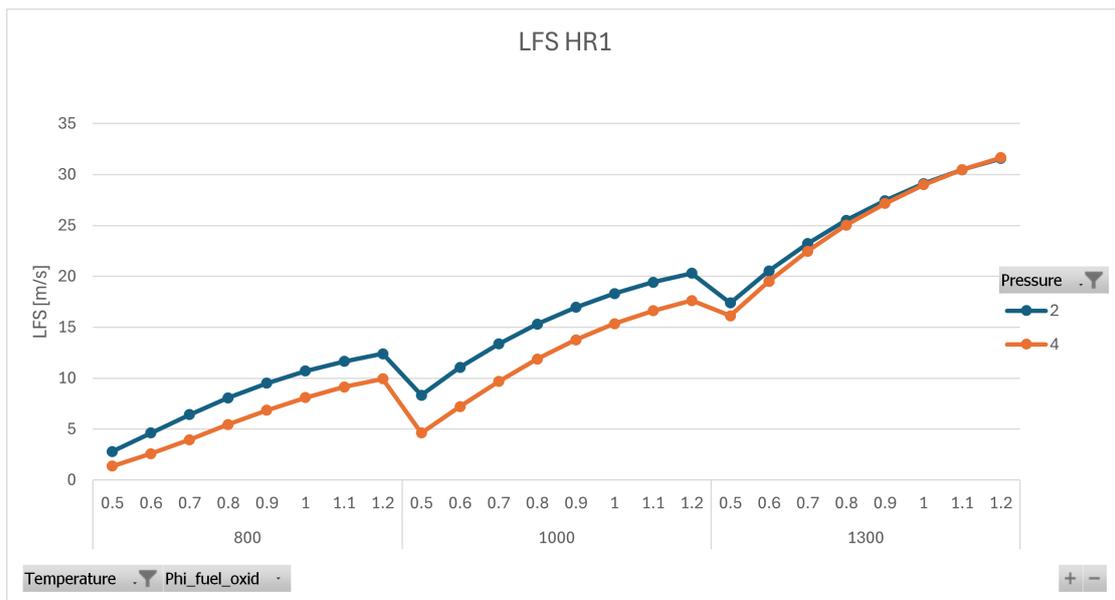


Figura 5.4: Risultati LFS HR1

Dall'analisi dei risultati ottenuti, si osserva che la composizione della miscela combustibile influisce in modo significativo sulla posizione del picco di velocità di fiamma laminare al variare del rapporto di equivalenza ( $\phi$ ). In particolare, all'aumentare della frazione di metano nella miscela idrogeno-metano, il valore di  $\phi$  per cui si verifica la massima velocità laminare tende ad avvicinarsi alla condizione stechiometrica ( $\phi = 1$ ). Viceversa, con un contenuto maggiore di idrogeno, il picco si sposta verso miscele ricche ( $\phi > 1$ ). Questo comportamento deriva dalle differenti proprietà chimico-fisiche dei due combustibili.

L'idrogeno è caratterizzato da un'elevata reattività, una bassa energia di attivazione, un'ampia gamma di infiammabilità e un'elevata diffusività, che gli consente di propagarsi efficacemente anche in miscele ricche. In queste condizioni, la presenza di un eccesso di combustibile, combinata con la facilità di innesco e la rapida formazione di radicali reattivi ( $H\bullet$ ,  $OH\bullet$ ), porta a una velocità di fiamma massima per valori di  $\phi$  tipicamente compresi tra 1.8 e 2.0.

Il metano, invece, è meno reattivo e presenta una velocità di fiamma massima in prossimità della stechiometria ( $\phi = 1.0-1.1$ ). In questo intervallo si verifica un bilanciamento ideale tra combustibile e ossidante, che consente una combustione completa ed efficiente. Al di fuori di questa fascia, la combustione è penalizzata: in condizioni povere per via della diluizione della miscela, in condizioni ricche per la carenza di ossigeno. Inoltre, la diffusività del metano, simile a quella dell'ossigeno, non conferisce un vantaggio significativo nelle miscele ricche, a differenza dell'idrogeno.

Le miscele idrogeno-metano mostrano quindi un comportamento intermedio, con una cinematica di fiamma che varia in funzione della composizione. All'aumentare della frazione di metano, l'effetto della maggiore reattività dell'idrogeno si attenua e la miscela assume un comportamento sempre più simile a quello del metano puro. Di conseguenza, il picco della velocità di fiamma si sposta progressivamente verso la stechiometria.

In sintesi, la posizione del massimo della velocità laminare in una miscela idrogeno-metano dipende dal bilanciamento tra le caratteristiche reattive e diffusionali dei due gas. L'idrogeno favorisce miscele ricche, mentre il metano predilige condizioni stechiometriche. La miscela, di conseguenza, assume un comportamento dipendente dalla sua composizione, in un continuum tra i due estremi.

Ora si può procedere con i risultati sulle simulazioni 1D della velocità di fiamma laminare.

## 5.2 Andamento LFS in funzione della temperatura

### 5.2.1 Risultati caso HR 0.25

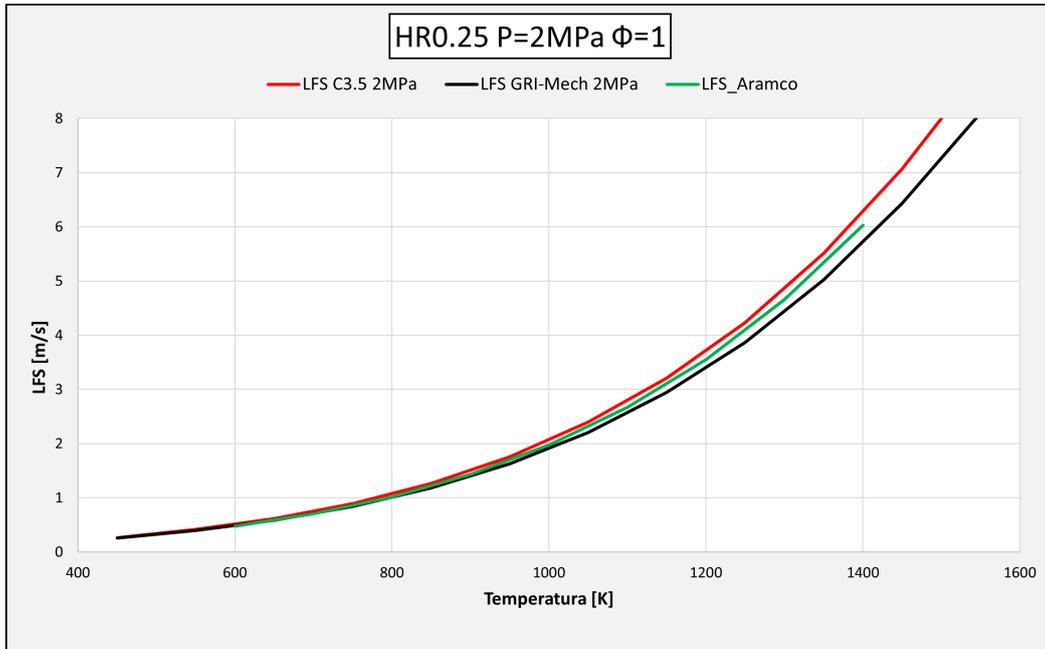


Figura 5.5: Risultati HR0.25, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 1$

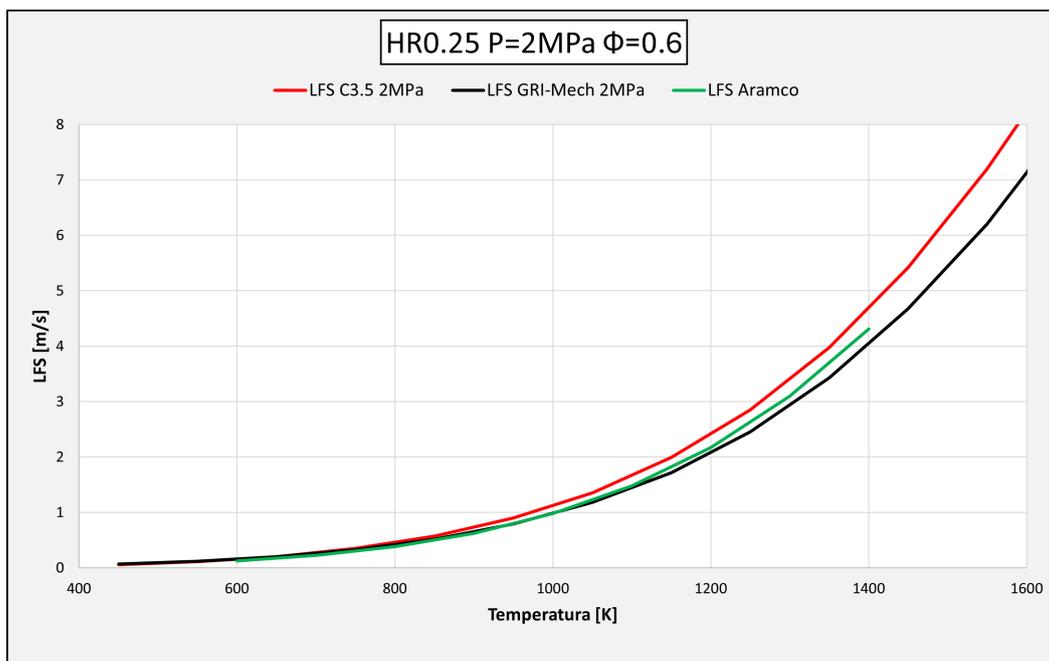


Figura 5.6: Risultati HR0.25, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

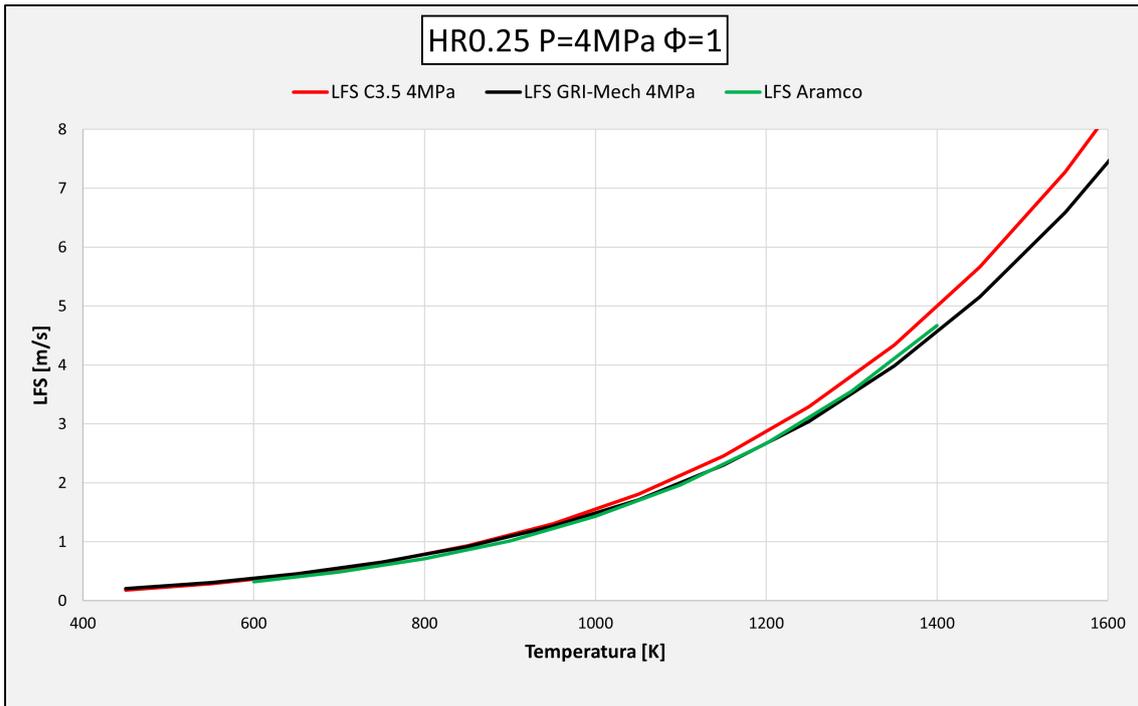


Figura 5.7: Risultati HR0.25, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 1$

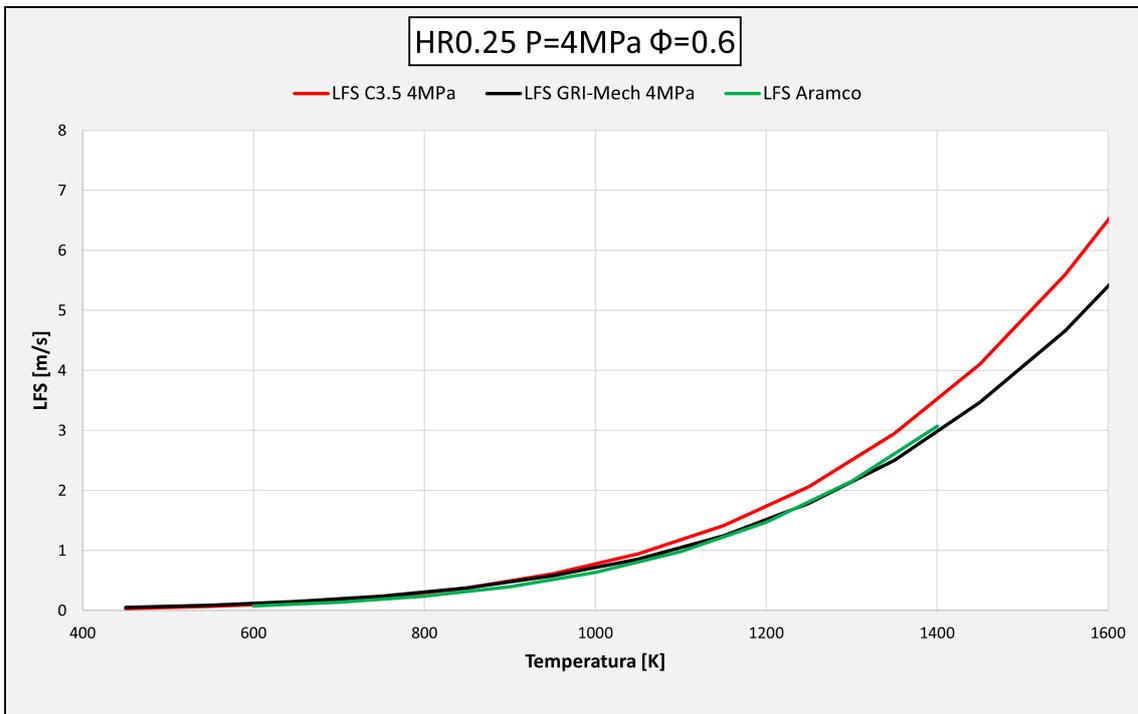


Figura 5.8: Risultati HR0.25, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

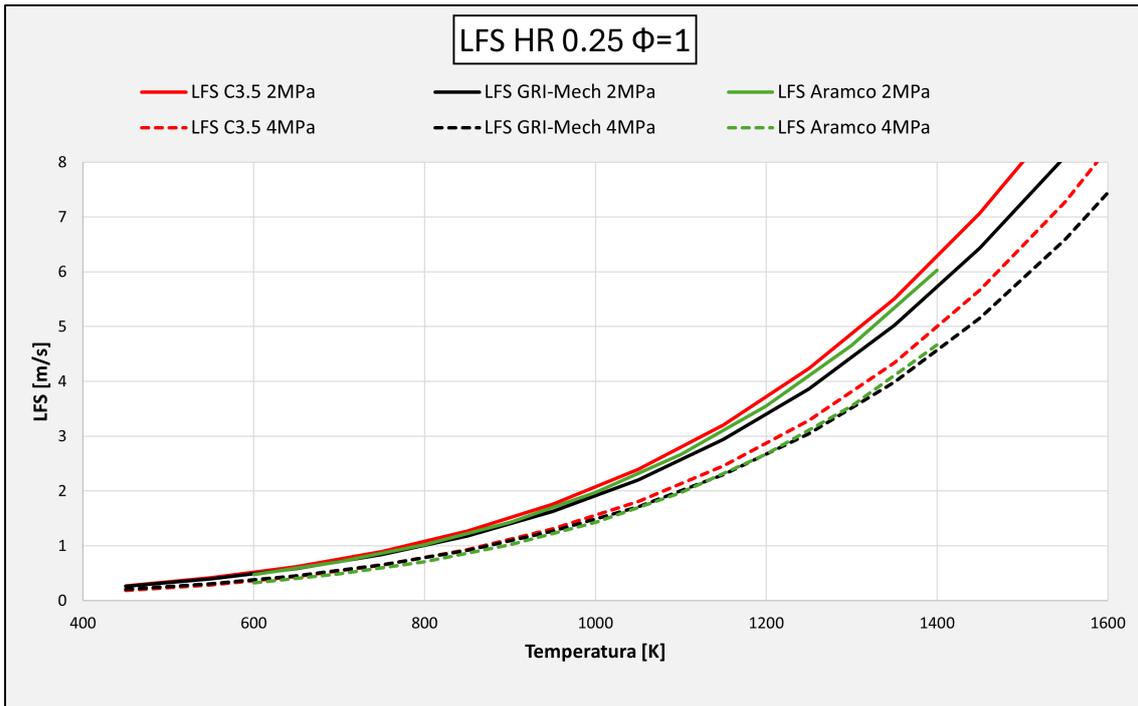


Figura 5.9: Risultati HR0.25,  $\Phi = 1$

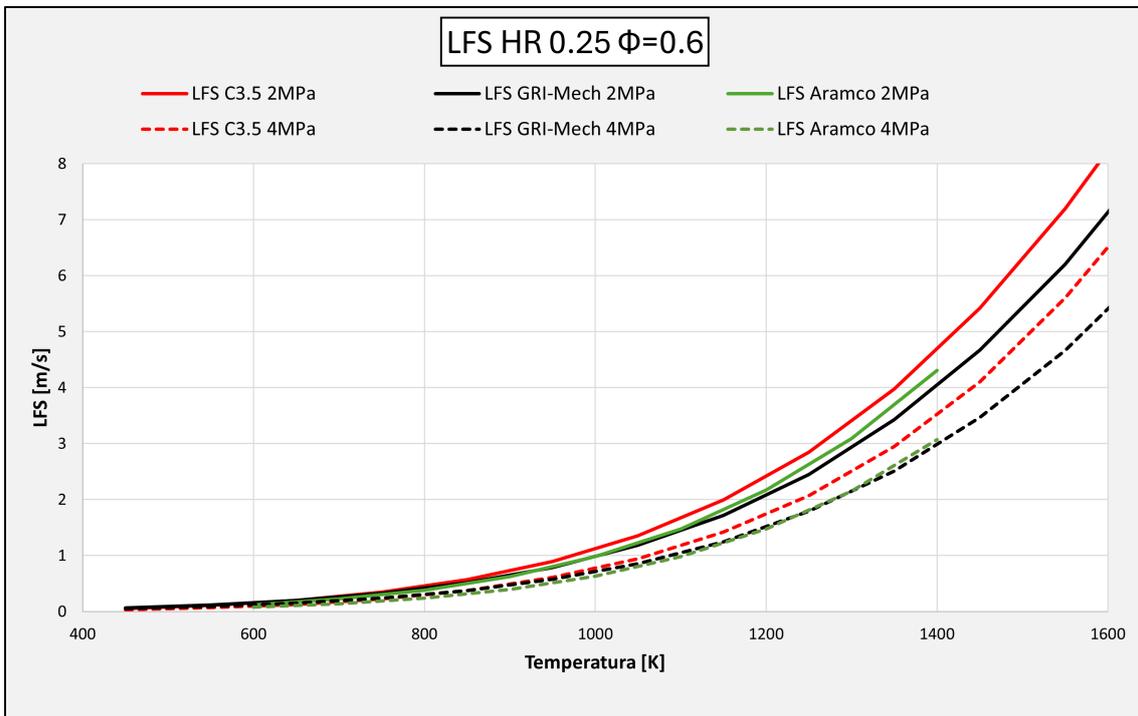


Figura 5.10: Risultati HR0.25,  $\Phi = 0.6$

### 5.2.2 Risultati caso HR 0.5

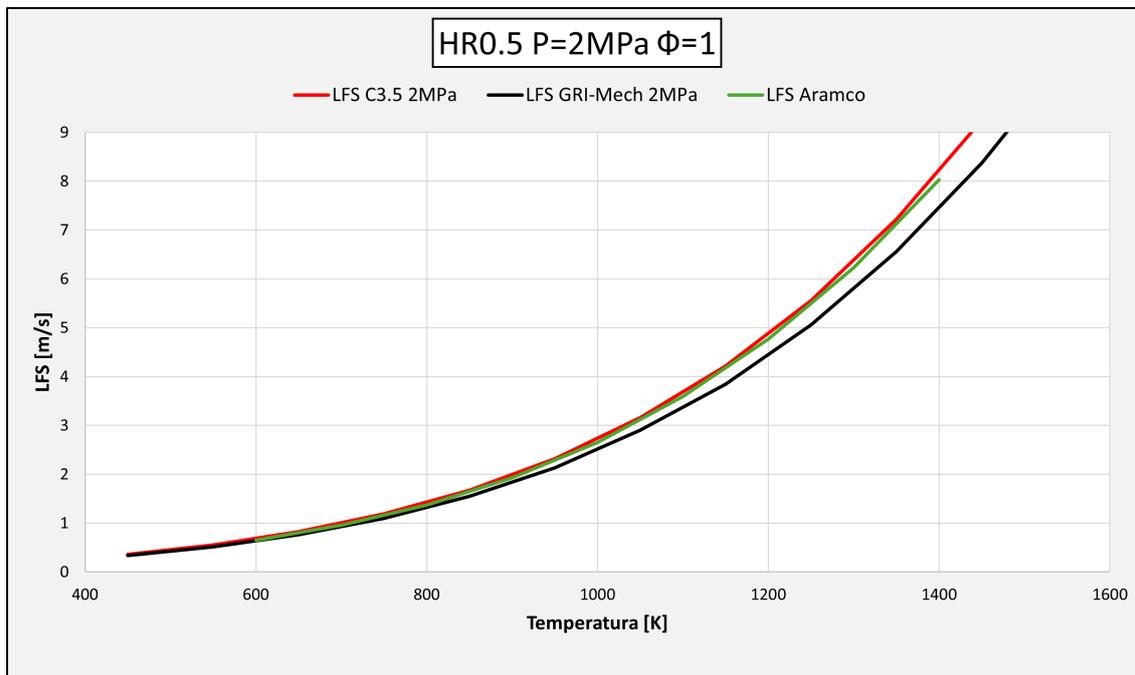


Figura 5.11: Risultati HR0.5, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 1$

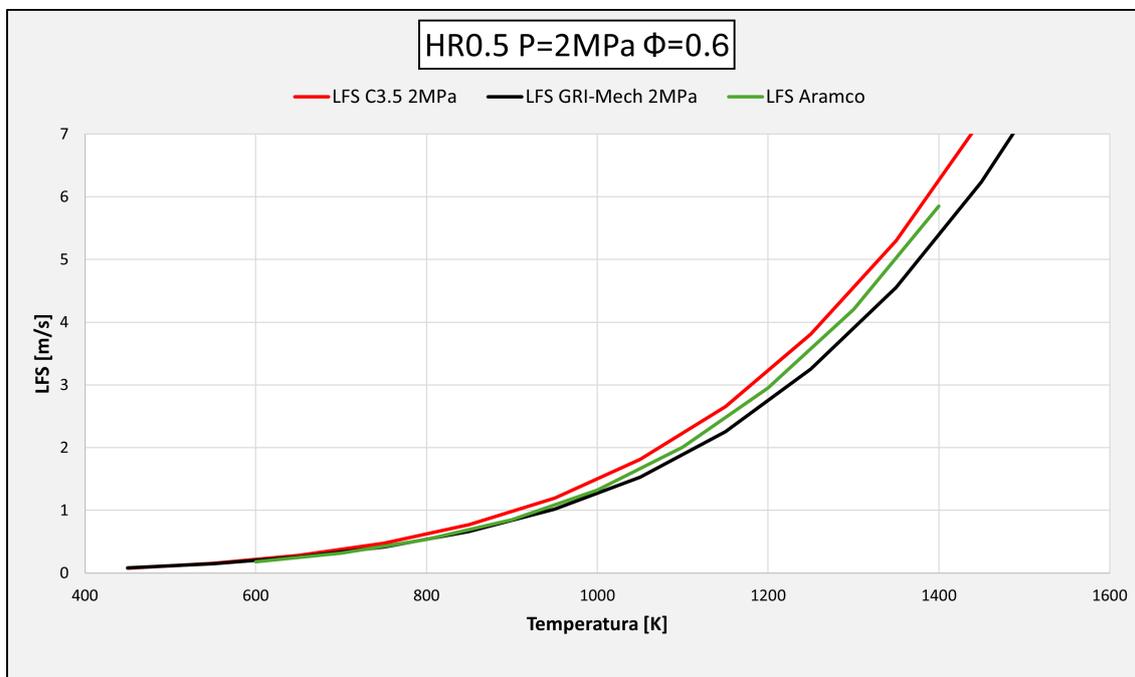


Figura 5.12: Risultati HR0.5, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

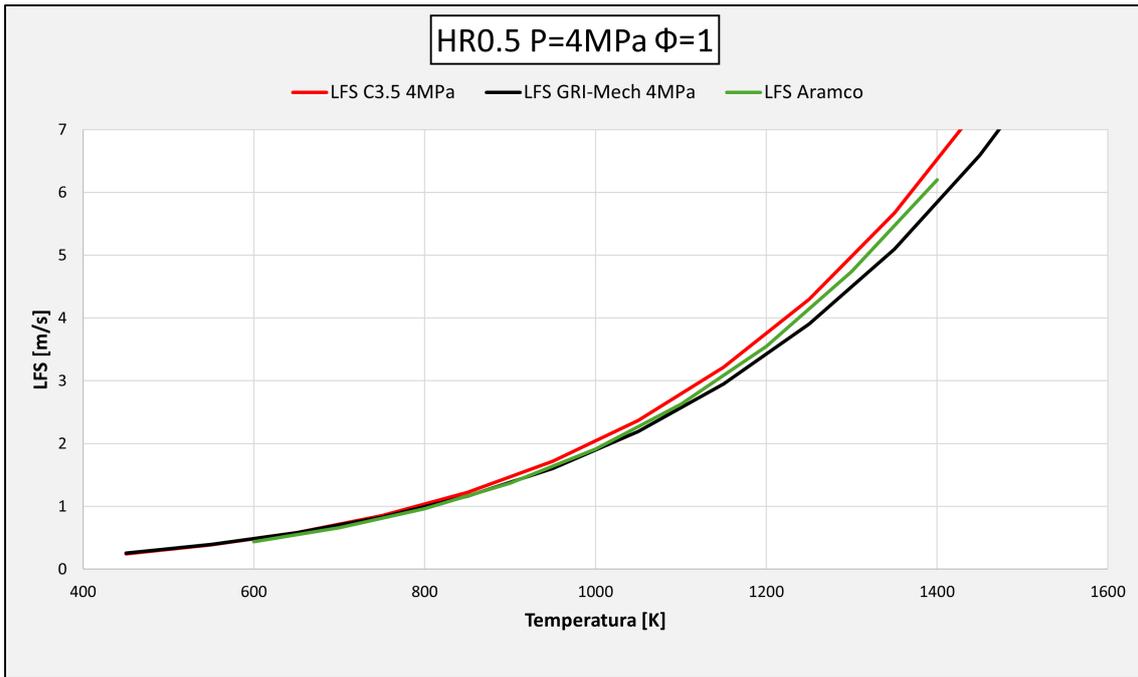


Figura 5.13: Risultati HR0.5, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 1$

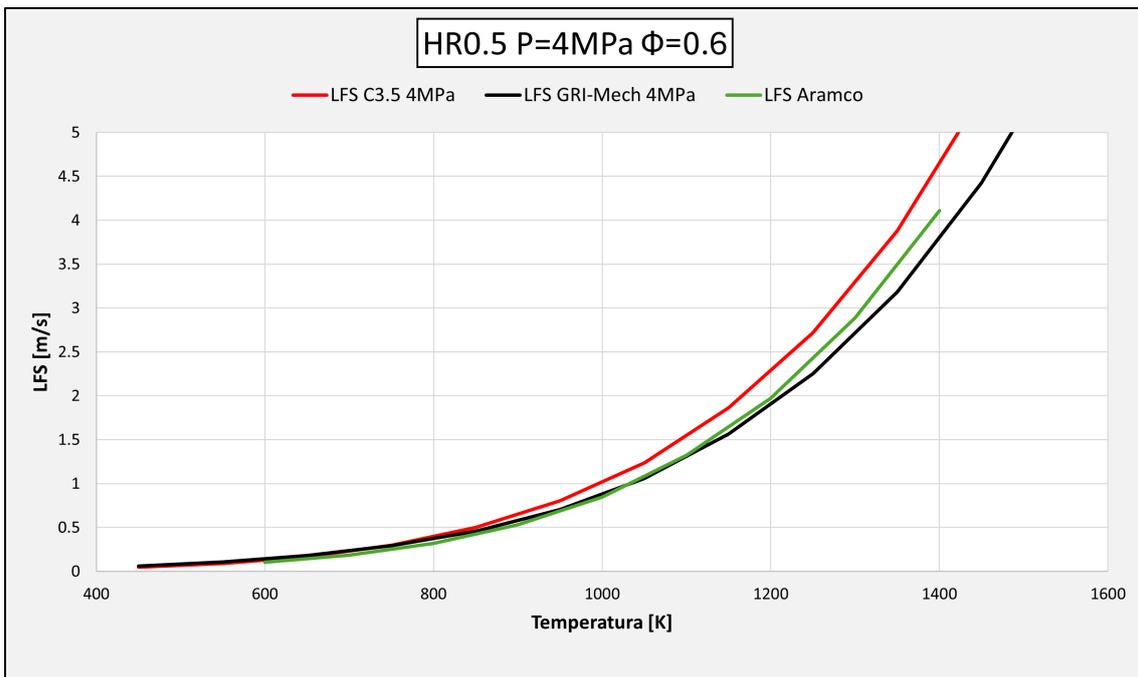


Figura 5.14: Risultati HR0.5, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

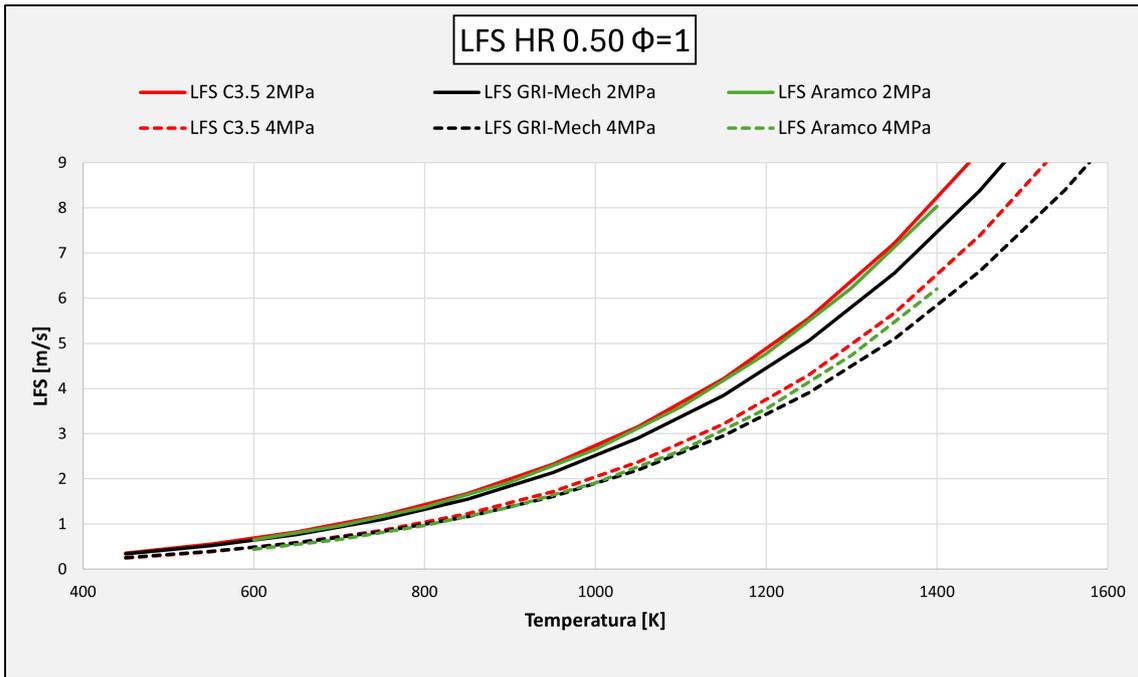


Figura 5.15: Risultati HR0.5,  $\Phi = 1$

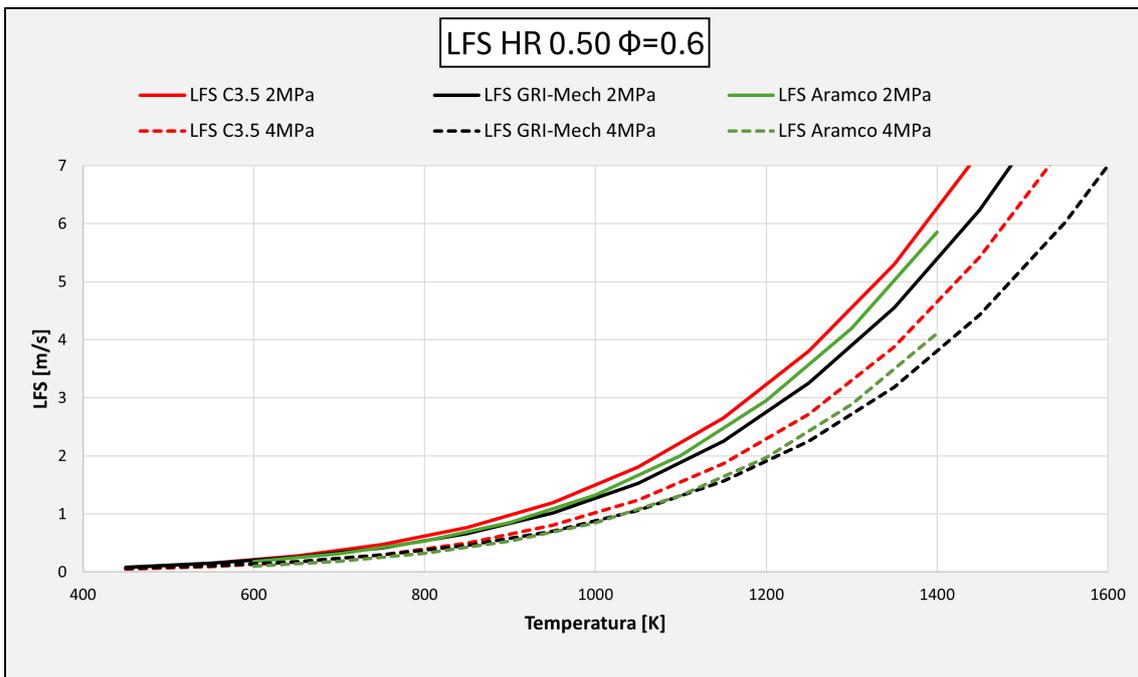


Figura 5.16: Risultati HR0.5,  $\Phi = 0.6$

### 5.2.3 Risultati caso HR 0.75

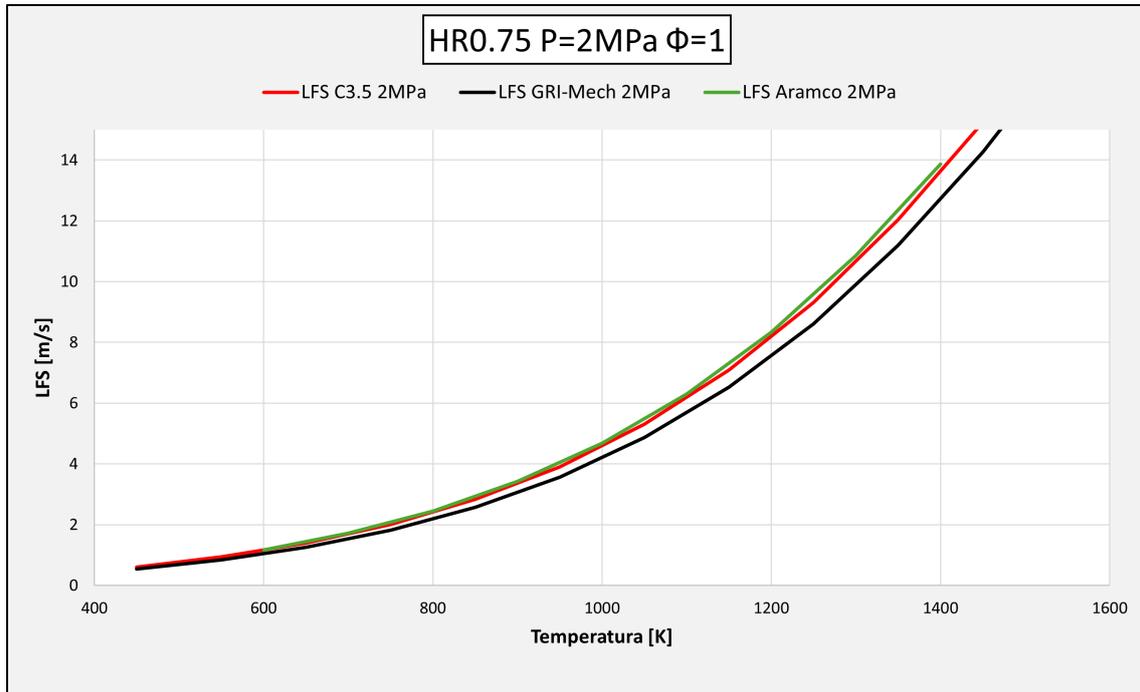


Figura 5.17: Risultati HR0.75, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 1$

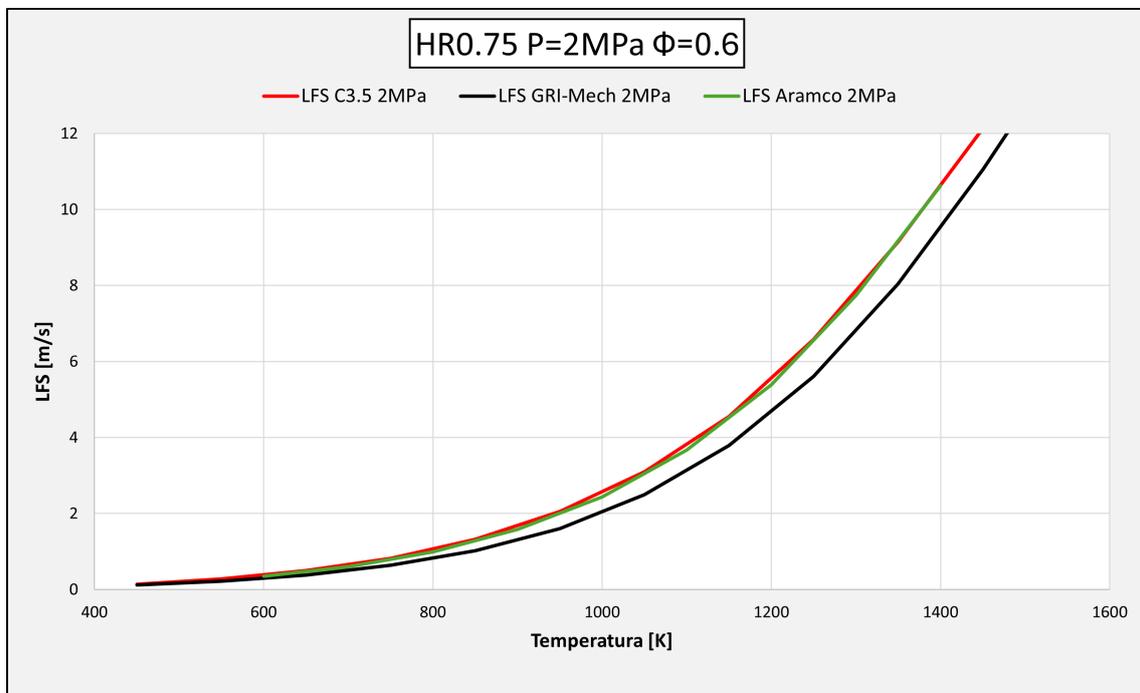


Figura 5.18: Risultati HR0.75, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

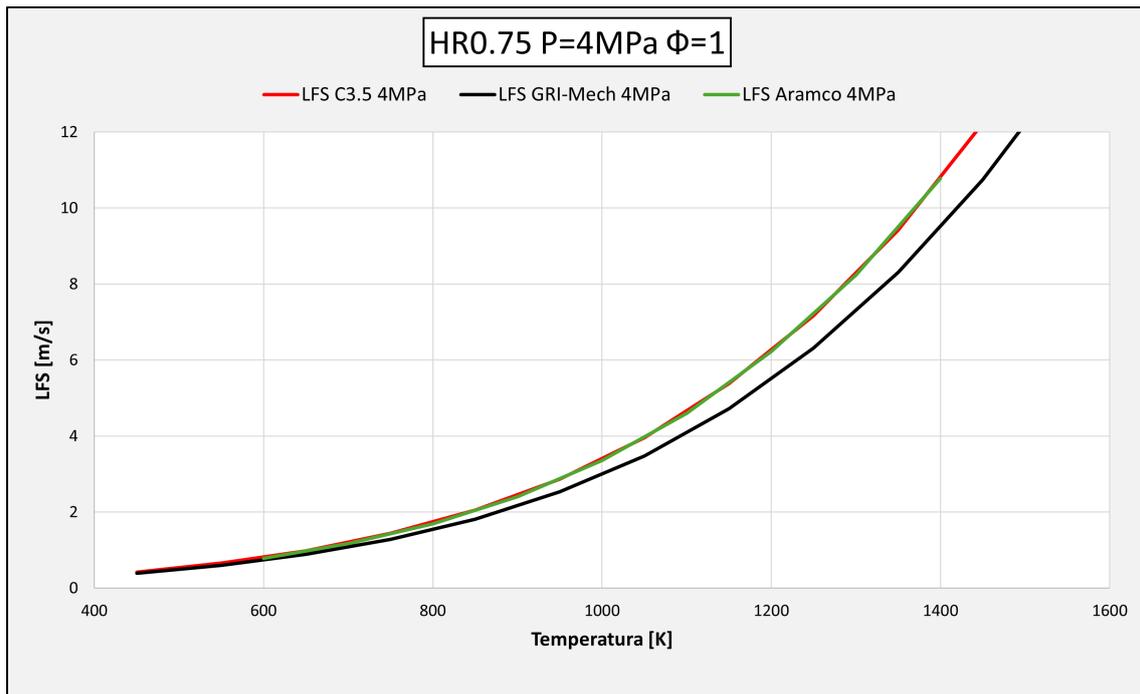


Figura 5.19: Risultati HR0.75, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 1$

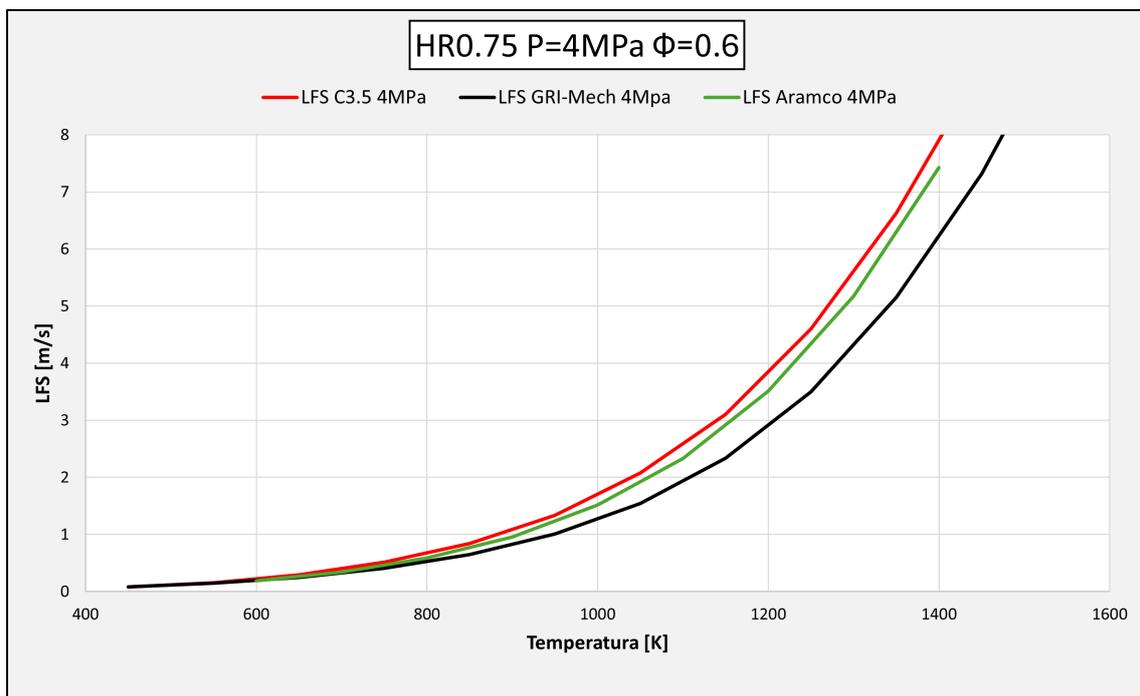


Figura 5.20: Risultati HR0.75, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

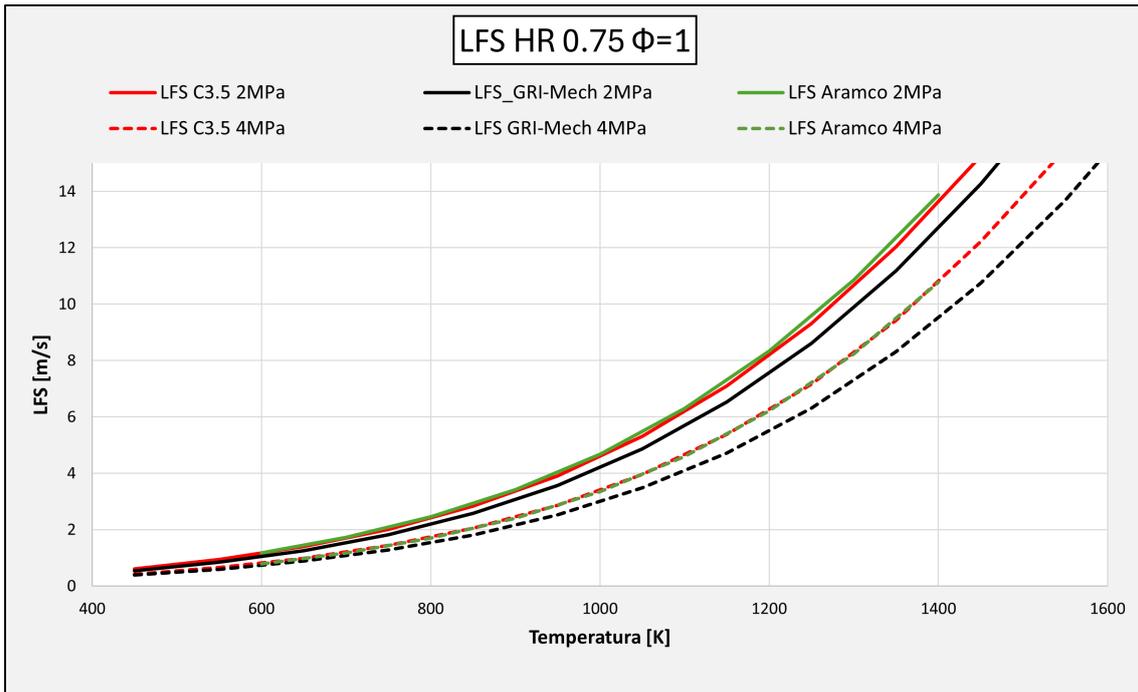


Figura 5.21: Risultati HR0.75,  $\Phi = 1$

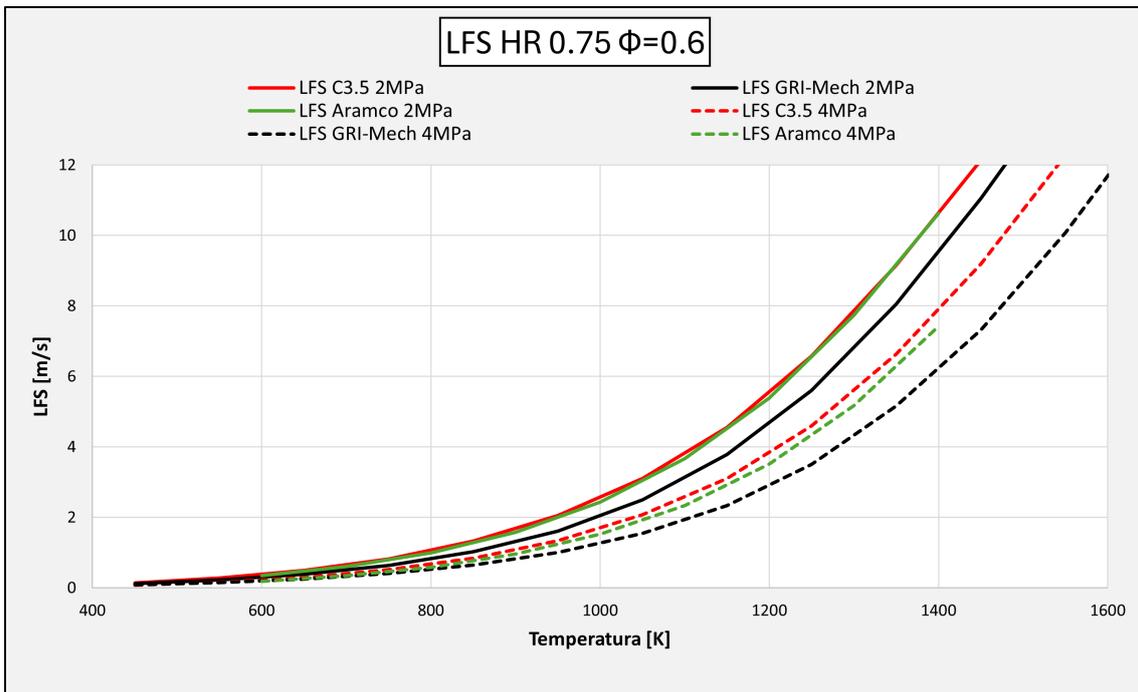


Figura 5.22: Risultati HR0.75,  $\Phi = 0.6$

### 5.2.4 Risultati caso HR 1

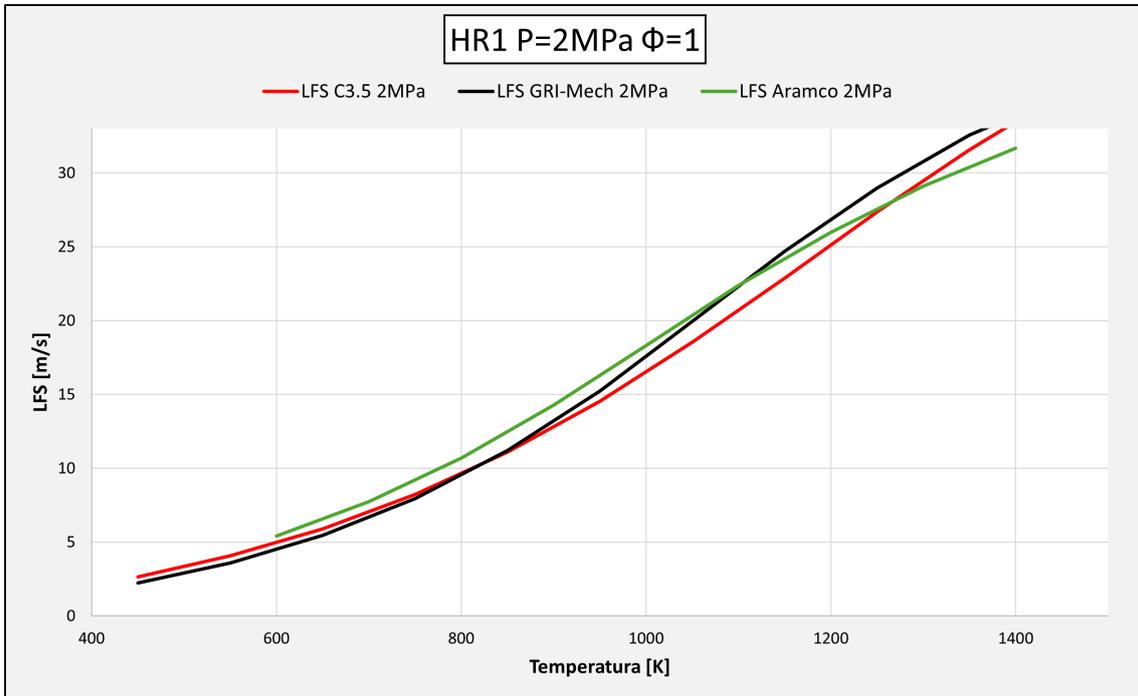


Figura 5.23: Risultati HR1, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 1$

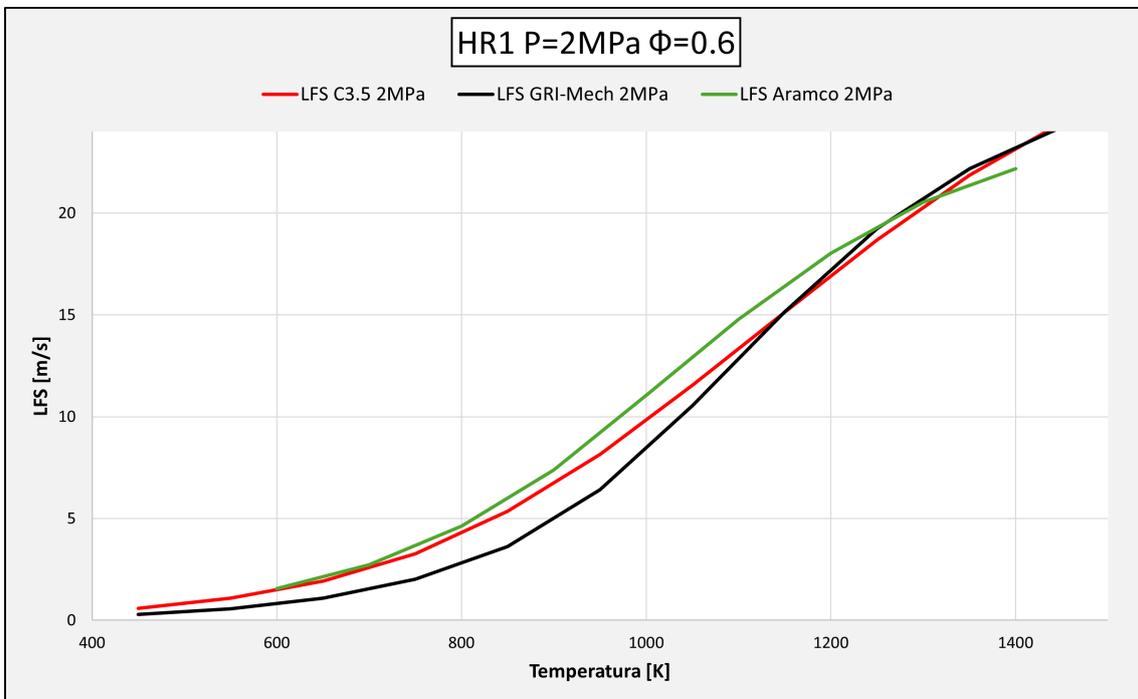


Figura 5.24: Risultati HR1, Pressione=2 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

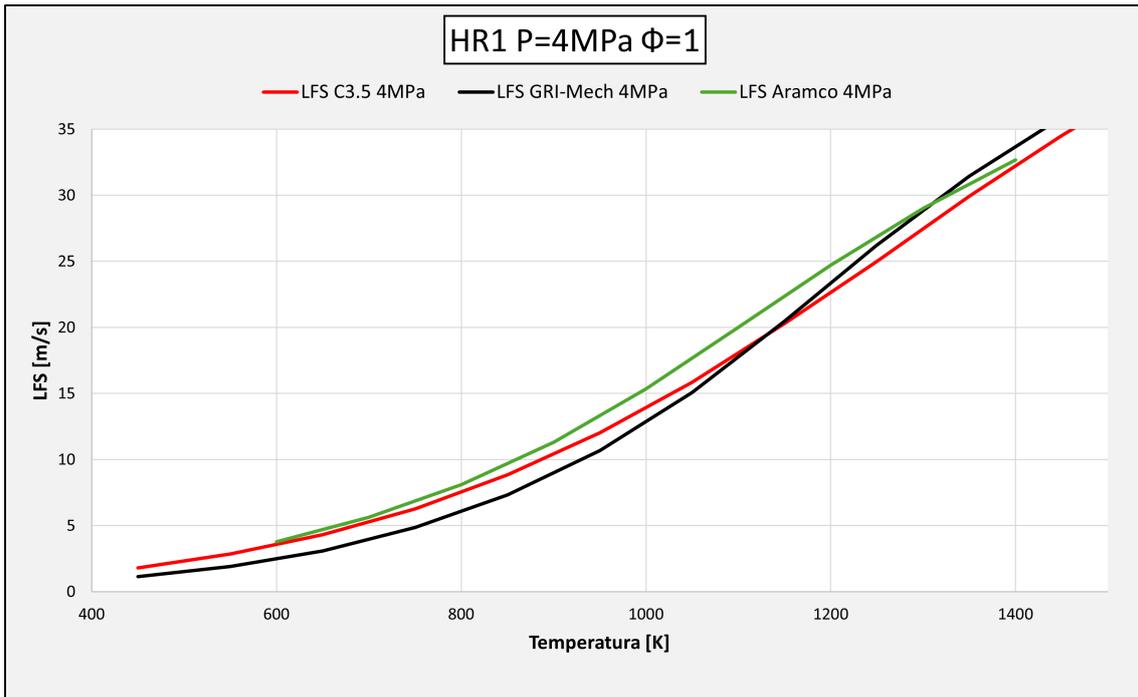


Figura 5.25: Risultati HR1, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 1$

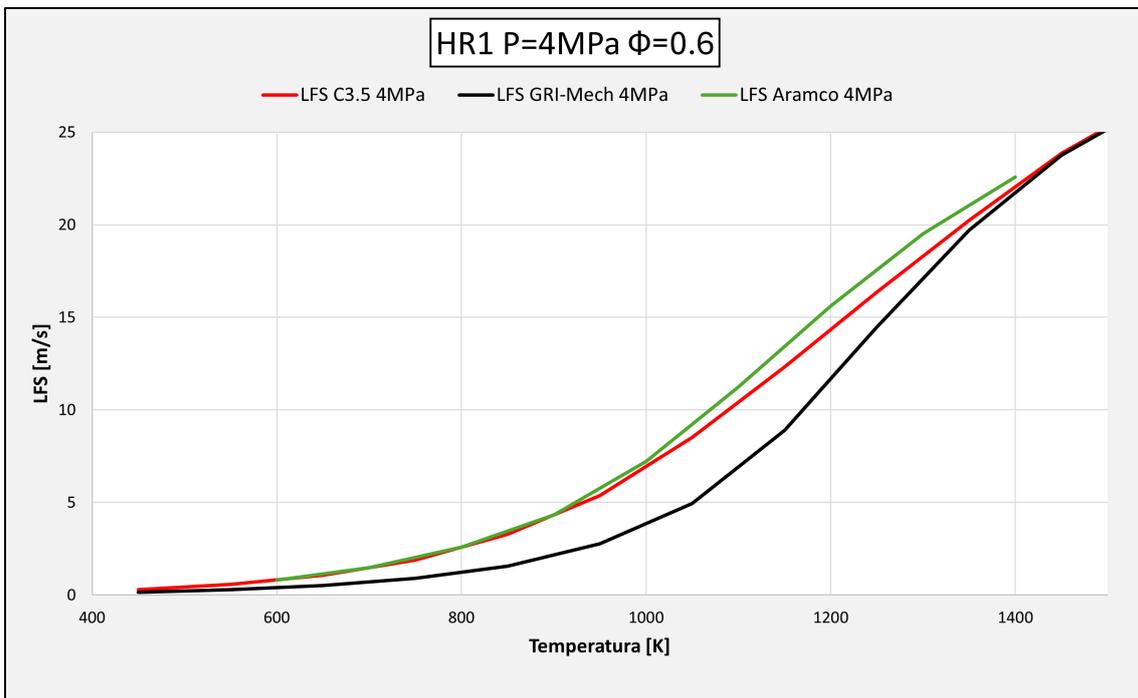


Figura 5.26: Risultati HR1, Pressione=4 MPa,  $\Phi = 0.6$

CAPITOLO 5. RISULTATI SIMULAZIONI 1D DELLA VELOCITÀ DI FIAMMA LAMINARE (LFS)

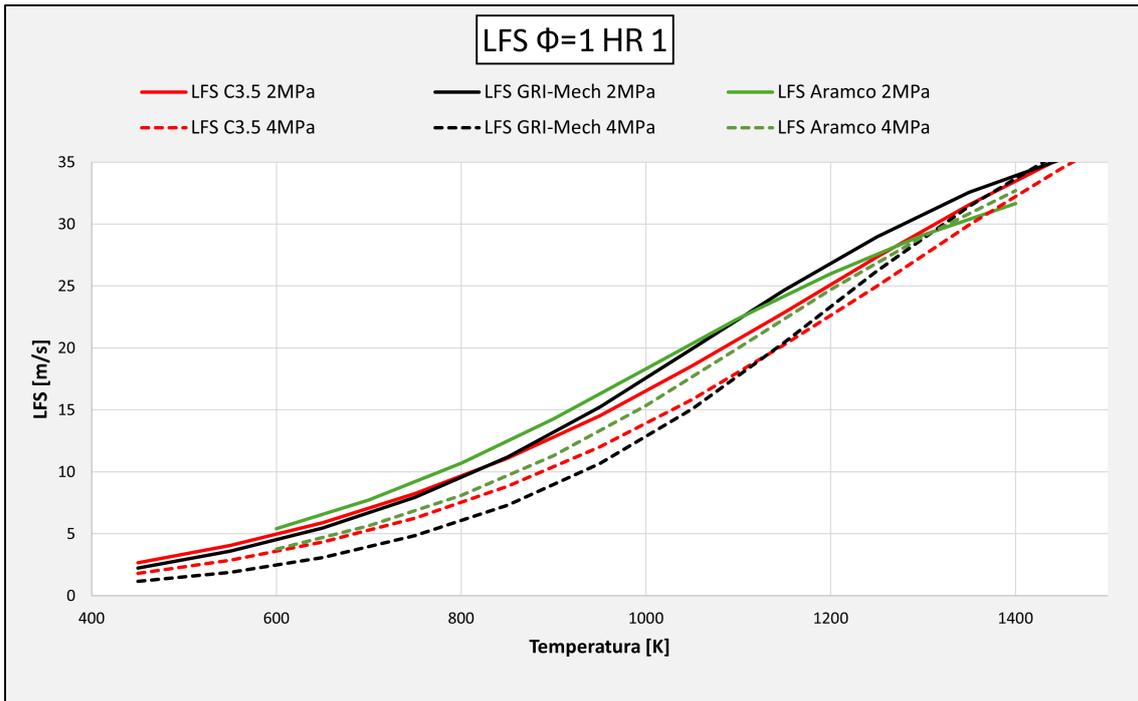


Figura 5.27: Risultati HR1,  $\Phi = 1$

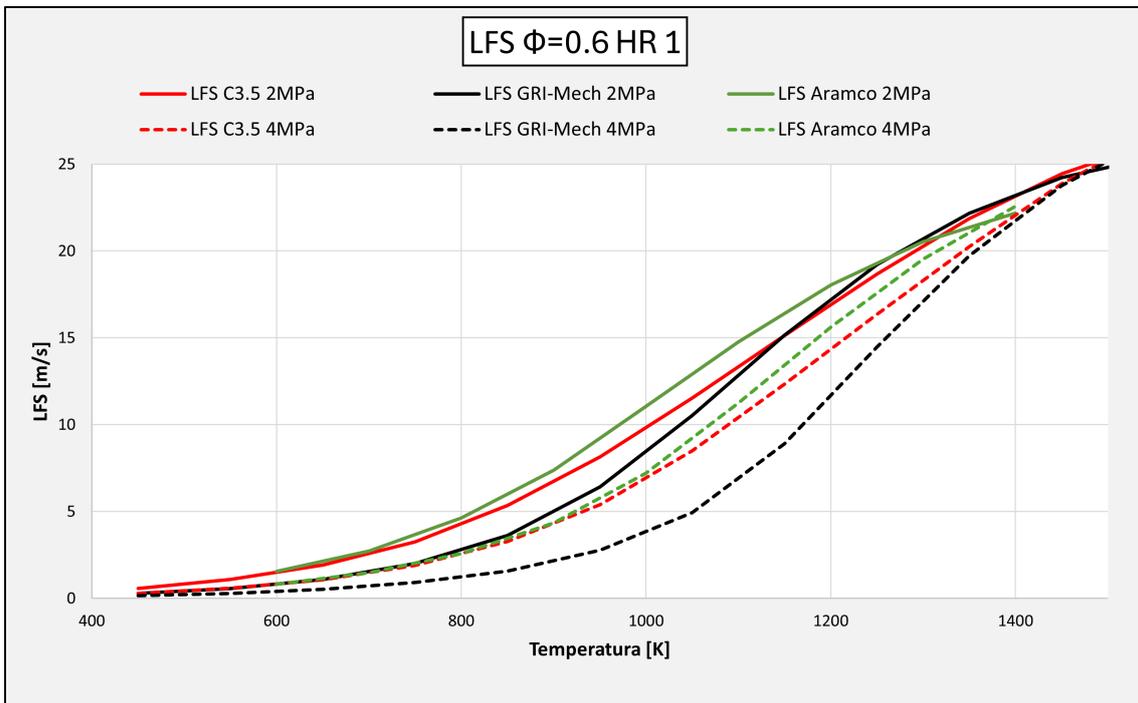


Figura 5.28: Risultati HR1,  $\Phi = 0.6$

Merita una considerazione particolare il caso di combustione con idrogeno puro ( $HR = 1$ ). Dai grafici si potrebbe concludere che i risultati ottenuti siano poco accurati; in realtà, tali andamenti sono del tutto prevedibili proprio per le caratteristiche intrinseche dell'idrogeno.

La discrepanza osservata per l'idrogeno puro è legata alle sue proprietà fisico-chimiche peculiari. In particolare, il suo elevato coefficiente di diffusione, nettamente superiore a quello di altri combustibili, può influenzare la velocità di fiamma laminare, rendendo i modelli più sensibili alla discretizzazione spaziale e ai parametri di trasporto.

Nel caso di miscele (ad esempio con frazioni molari di idrogeno pari a 0.25, 0.5 e 0.75), la presenza del metano modifica il regime di fiamma, contribuendo alla sua stabilizzazione o rallentandone la propagazione rispetto all'idrogeno puro. Questo effetto rende i risultati più coerenti con i modelli esistenti.

Infine, la combustione dell'idrogeno puro può favorire l'insorgenza di regimi di fiamma instabili o transizioni tra differenti modalità di propagazione, fenomeni che potrebbero non essere riprodotti perfettamente dai modelli di velocità di fiamma laminare.

### 5.3 Discussione dei risultati 1D

L'analisi condotta sulla velocità di fiamma laminare ha permesso di ottenere un quadro preliminare dell'evoluzione della reattività della miscela idrogeno-metano al variare della composizione e delle condizioni operative.

I risultati ottenuti tramite interpolazione dei dati presenti in letteratura evidenziano chiaramente l'incremento della velocità di propagazione della fiamma all'aumentare della frazione molare di idrogeno nella miscela, confermando il comportamento atteso sulla base delle proprietà chimico-fisiche del combustibile.

Tale approccio, pur basato su una metodologia semplificata, ha consentito di delineare una tendenza utile per la successiva fase simulativa CFD. Inoltre, l'uso di tabelle precalcolate e interpolazioni mirate si è dimostrato un metodo efficace per valutazioni preliminari, soprattutto in contesti in cui le simulazioni numeriche risultano onerose in termini computazionali. Tuttavia, si sottolinea che l'approccio tabellare, pur utile, presenta dei limiti legati all'assenza di fenomeni tridimensionali e non può sostituire completamente una modellazione diretta della combustione.

## 6 Risultati simulazioni 3D di combustione con modello Aramco

Una volta generate le tabelle 1D della velocità di fiamma laminare per ciascun caso analizzato, queste sono state integrate all'interno del modello di simulazione generale. Successivamente, sono stati definiti i parametri principali della simulazione, in particolare l'intervallo temporale compreso tra  $-25^\circ$  sec e  $80^\circ$  sec rispetto al raggiungimento del punto morto superiore da parte del pistone, momento in cui avvengono l'innesco e la propagazione della combustione. A questo punto, è stato possibile avviare l'esecuzione della simulazione, dalla quale sono stati ottenuti risultati molto soddisfacenti in termini di accuratezza e coerenza con i dati attesi.

I risultati ottenuti sono poi stati analizzati e confrontati, come fatto nelle simulazioni 1D, in termini di:

- Pressione all'interno del cilindro
- Pressione in pre-camera
- Apparent Heat Release Rate (AHRR)
- Mass Fraction Burned (MFB)

## 6.1 Risultati caso HR 0.25, $\Phi = 1$

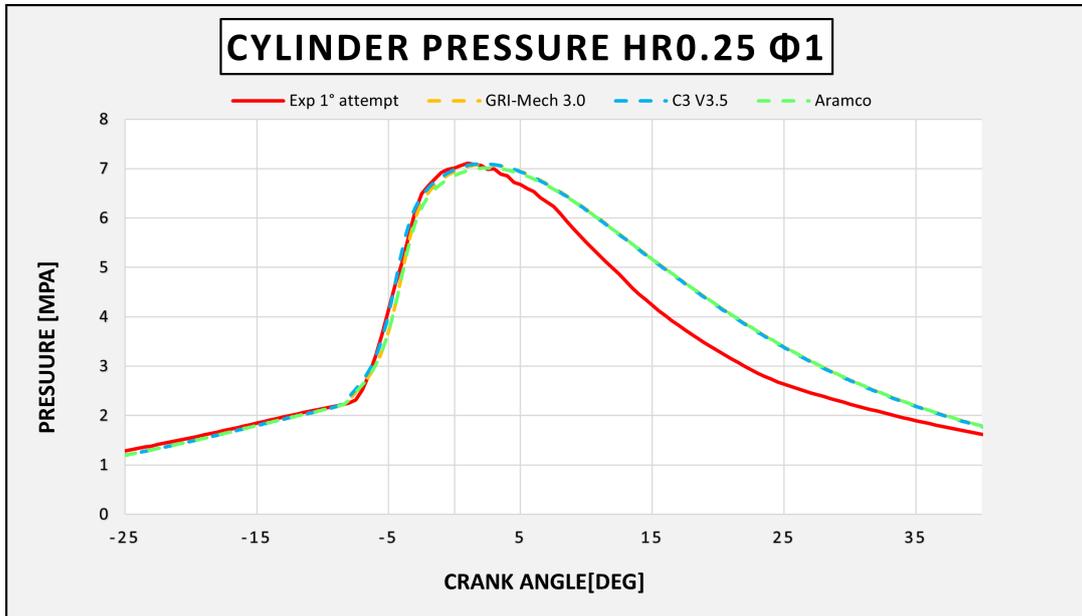


Figura 6.1: Andamento Pressione Cilindro HR0.25,  $\Phi = 1$

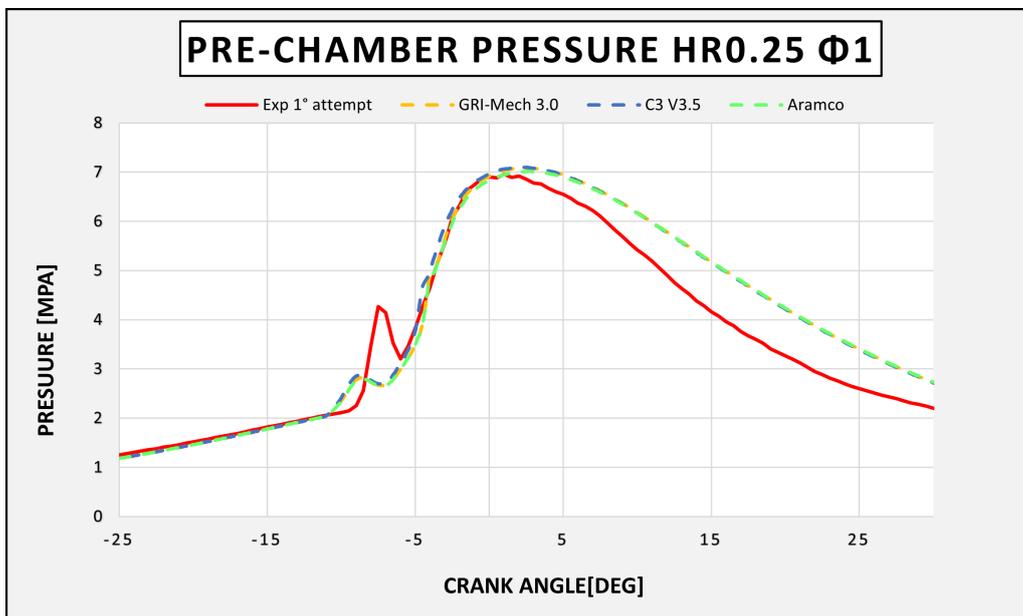


Figura 6.2: Andamento Pressione in pre-camera HR0.25,  $\Phi = 1$

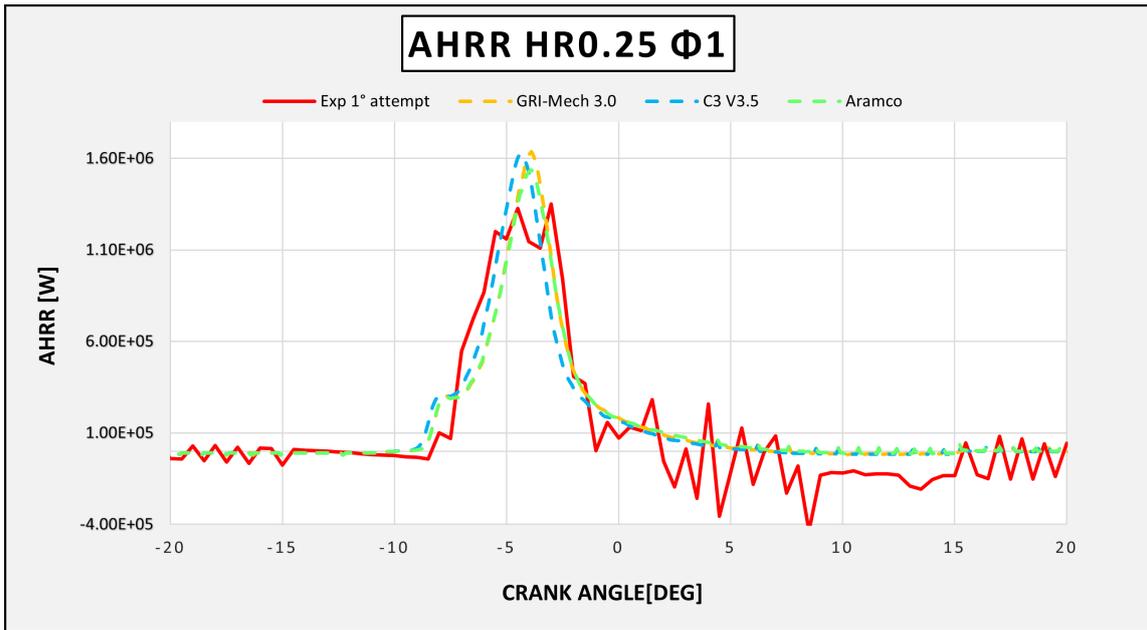


Figura 6.3: Apparent Heat Release Rate HR0.25,  $\Phi = 1$

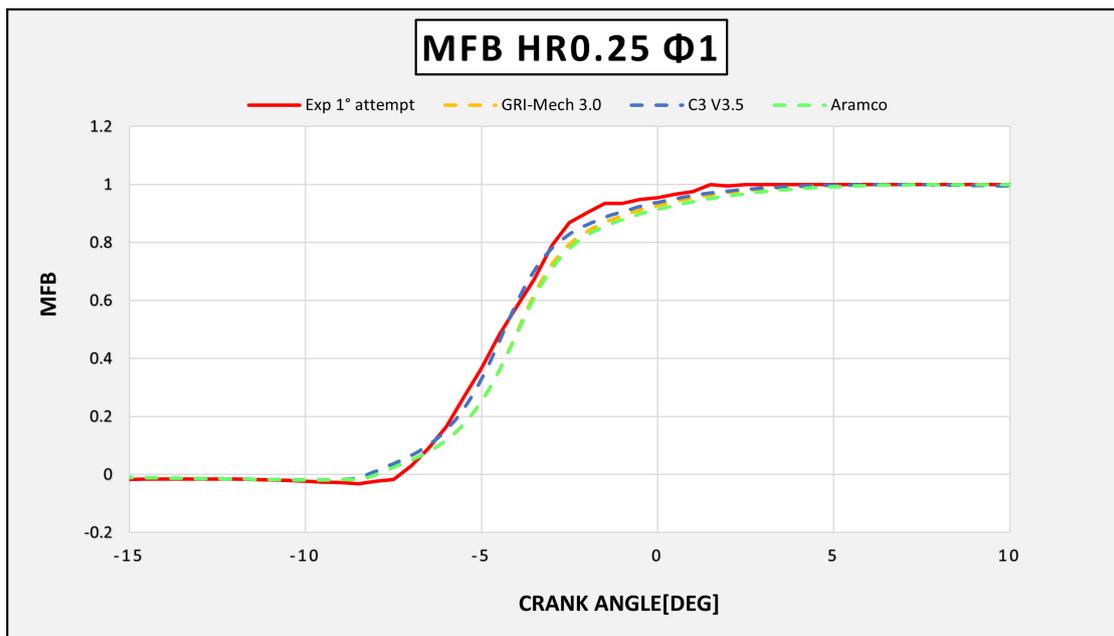


Figura 6.4: Mass Fraction Burned HR0.25,  $\Phi = 0.1$

## 6.2 Risultati caso HR 0.25, $\Phi = 0.625$

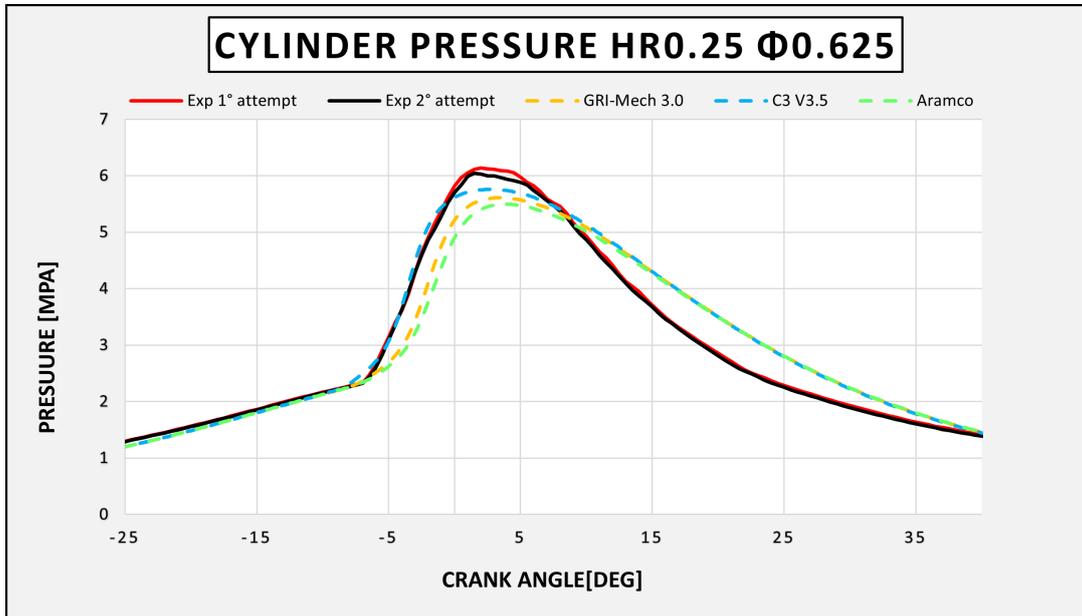


Figura 6.5: Andamento Pressione Cilindro HR0.25,  $\Phi = 0.625$

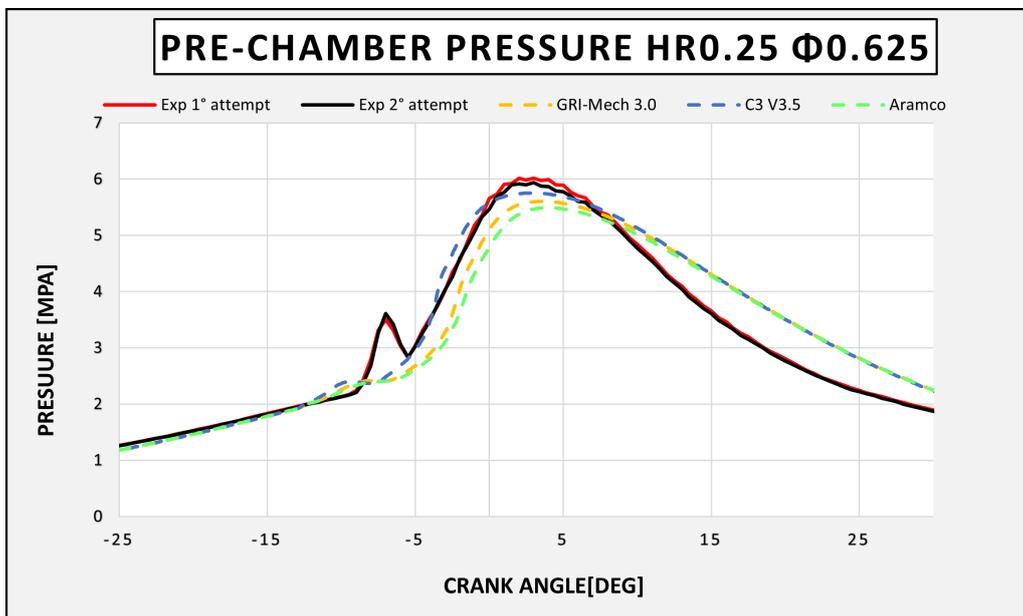


Figura 6.6: Andamento Pressione in pre-camera HR0.25,  $\Phi = 0.625$

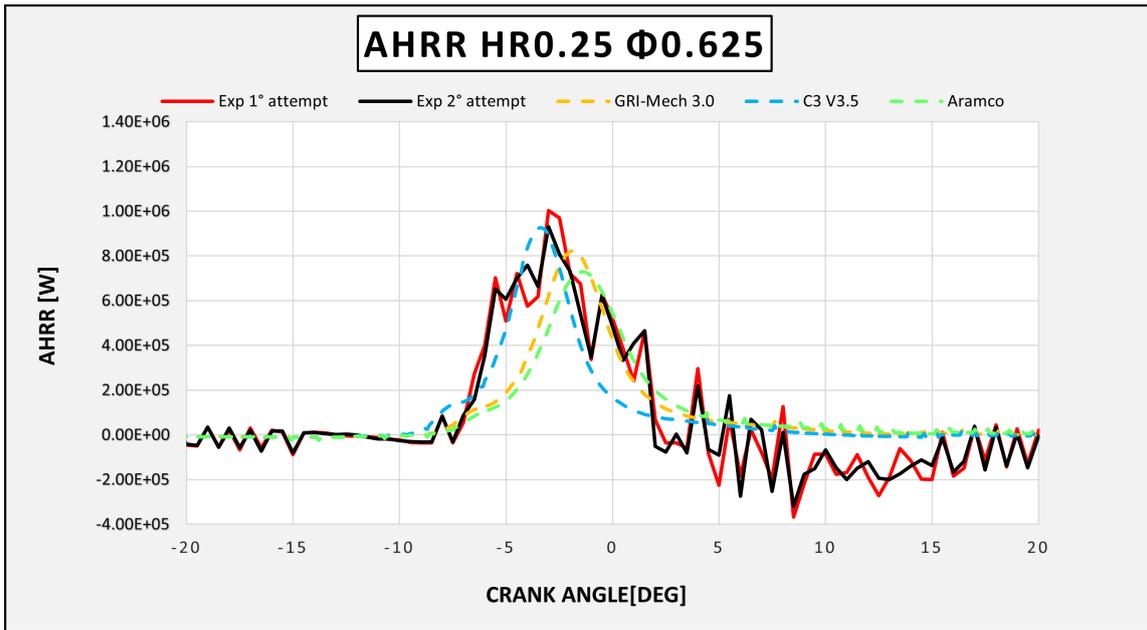


Figura 6.7: Apparent Heat Release Rate HR0.25,  $\Phi = 0.625$

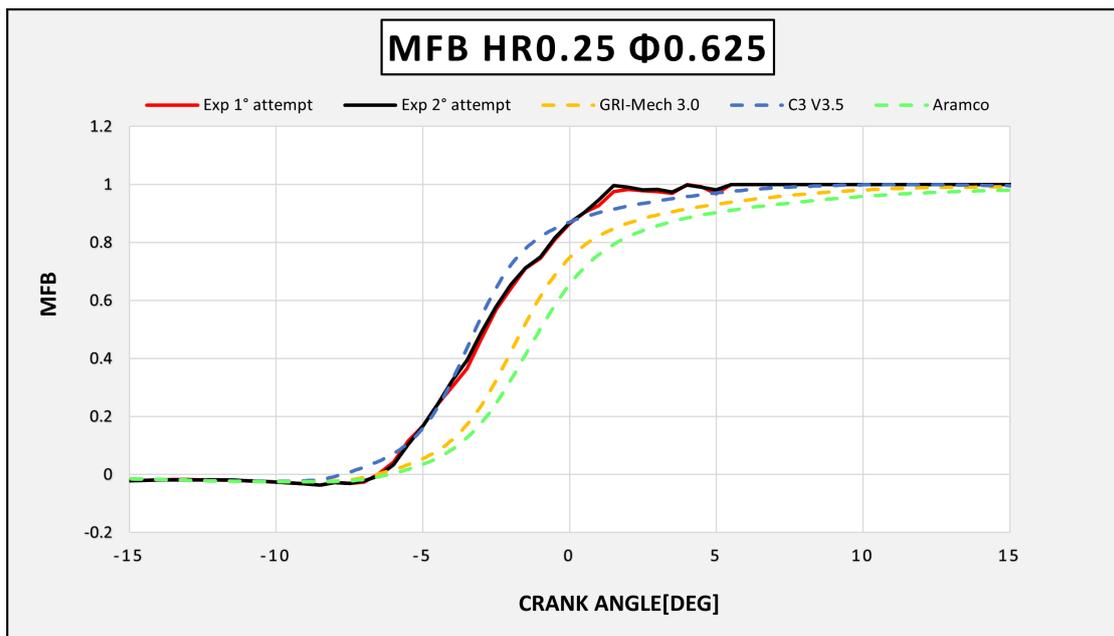


Figura 6.8: Mass Fraction Burned HR0.25,  $\Phi = 0.625$

### 6.3 Risultati caso HR 0.5, $\Phi = 1$

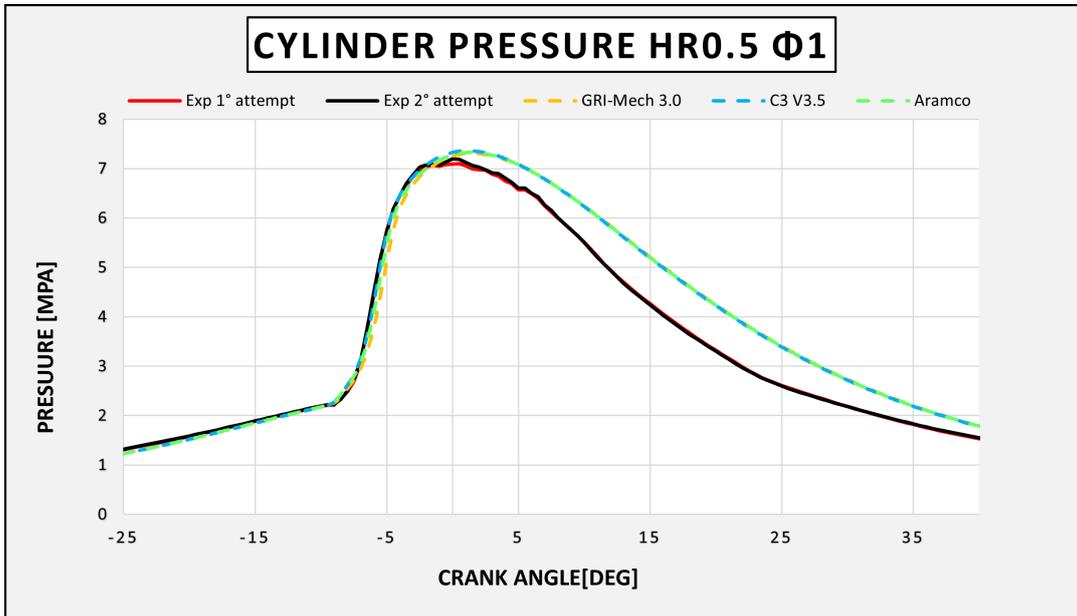


Figura 6.9: Andamento Pressione Cilindro HR0.5,  $\Phi = 1$

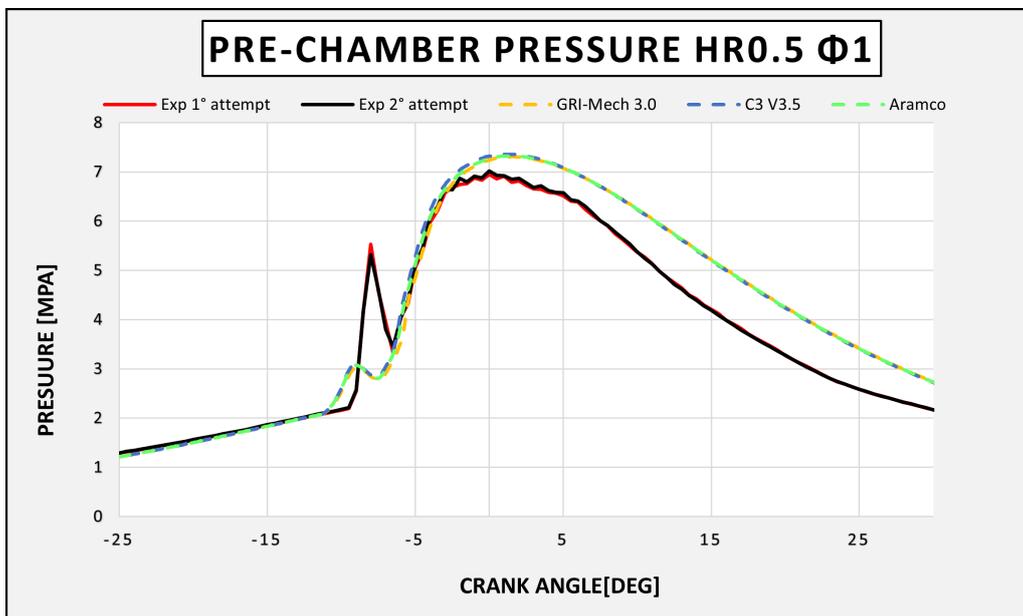


Figura 6.10: Andamento Pressione in pre-camera HR0.5,  $\Phi = 1$

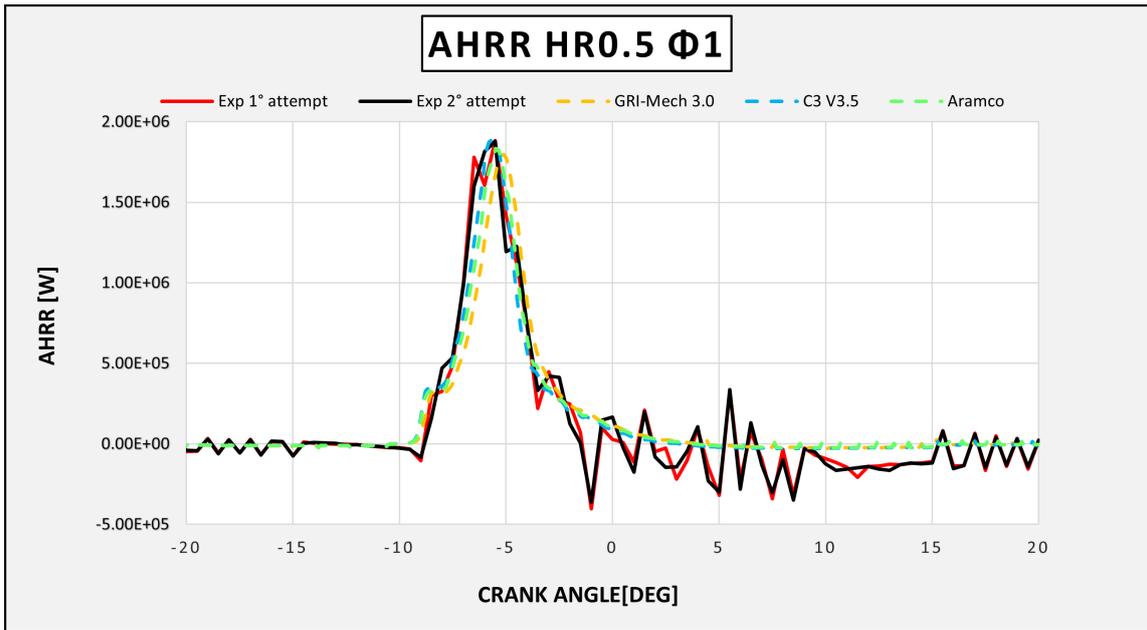


Figura 6.11: Apparent Heat Release Rate HR0.5,  $\Phi = 1$

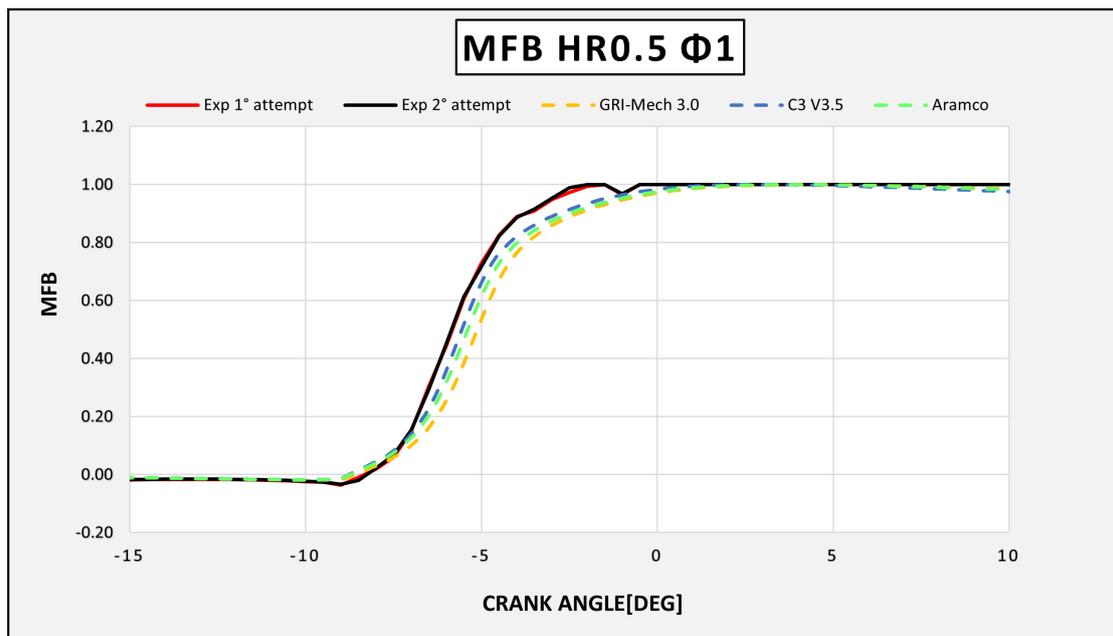


Figura 6.12: Mass Fraction Burned HR0.5,  $\Phi = 0.1$

## 6.4 Risultati caso HR 0.5, $\Phi = 0.625$

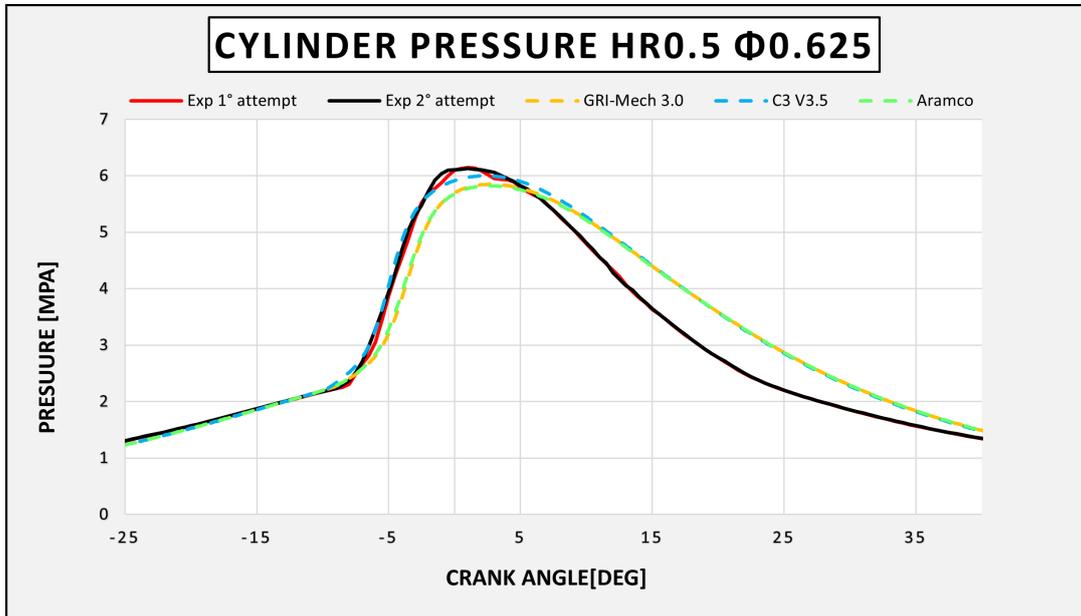


Figura 6.13: Andamento Pressione Cilindro HR0.5,  $\Phi = 0.625$

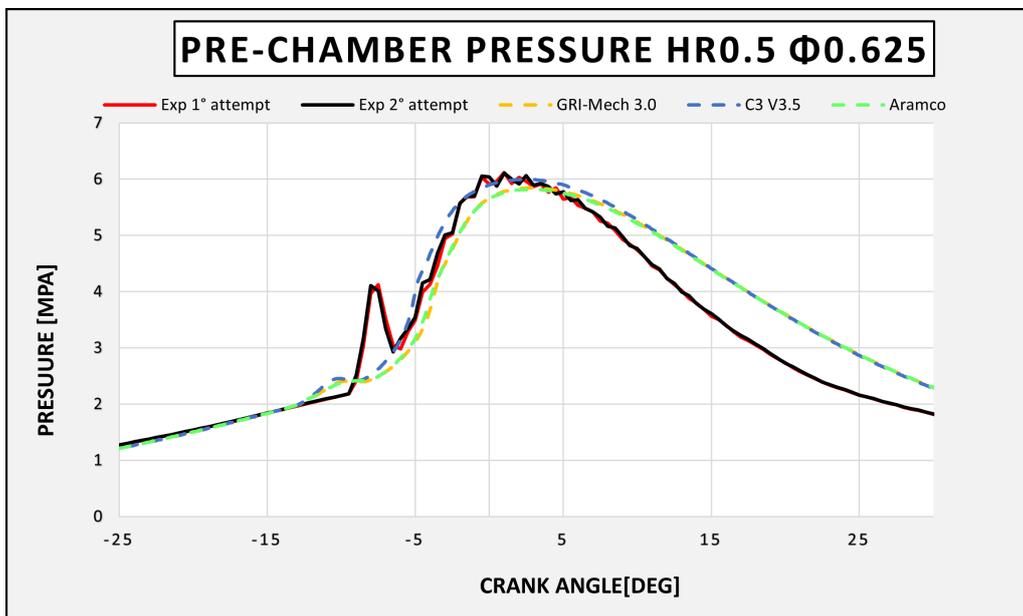


Figura 6.14: Andamento Pressione in pre-camera HR0.5,  $\Phi = 0.625$

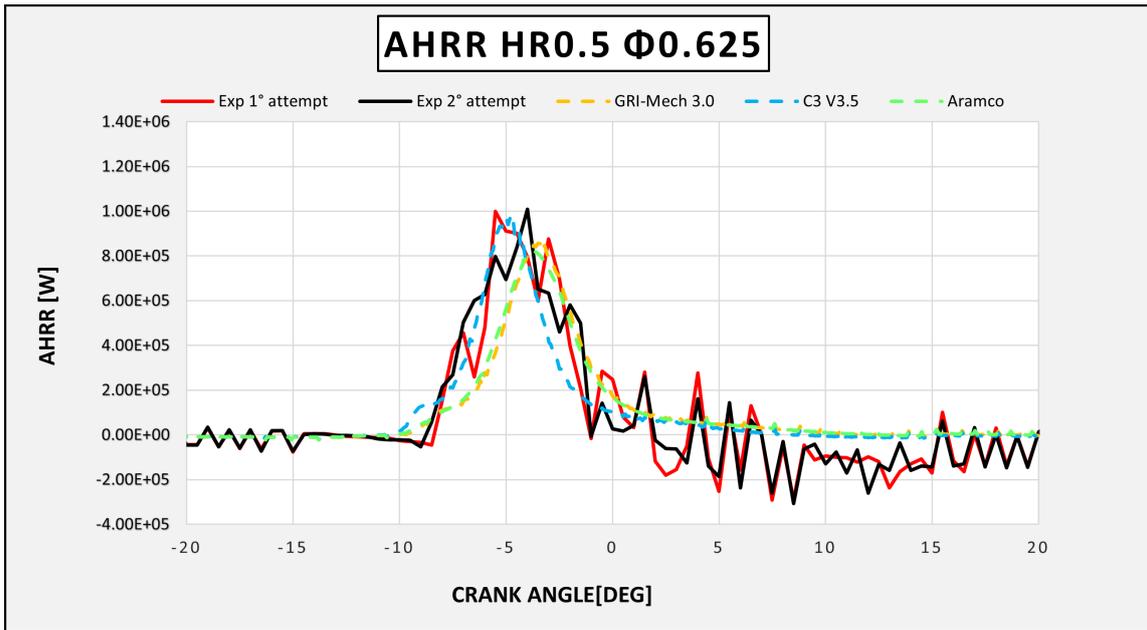


Figura 6.15: Apparent Heat Release Rate HR0.5,  $\Phi = 0.625$

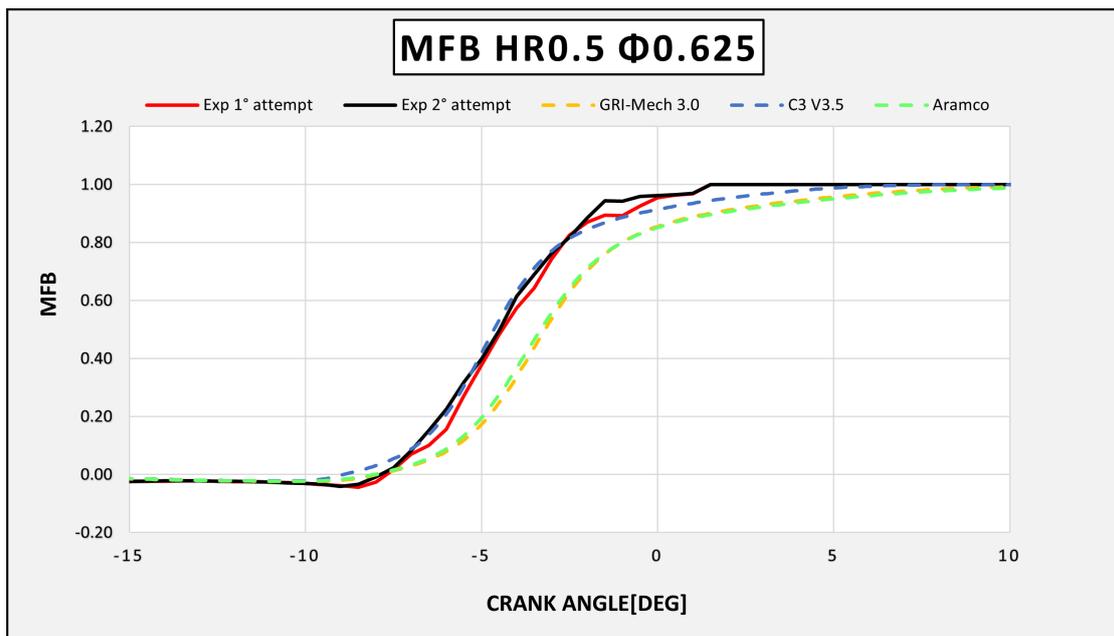


Figura 6.16: Mass Fraction Burned HR0.5,  $\Phi = 0.625$

## 6.5 Risultati caso HR 0.75, $\Phi = 1$

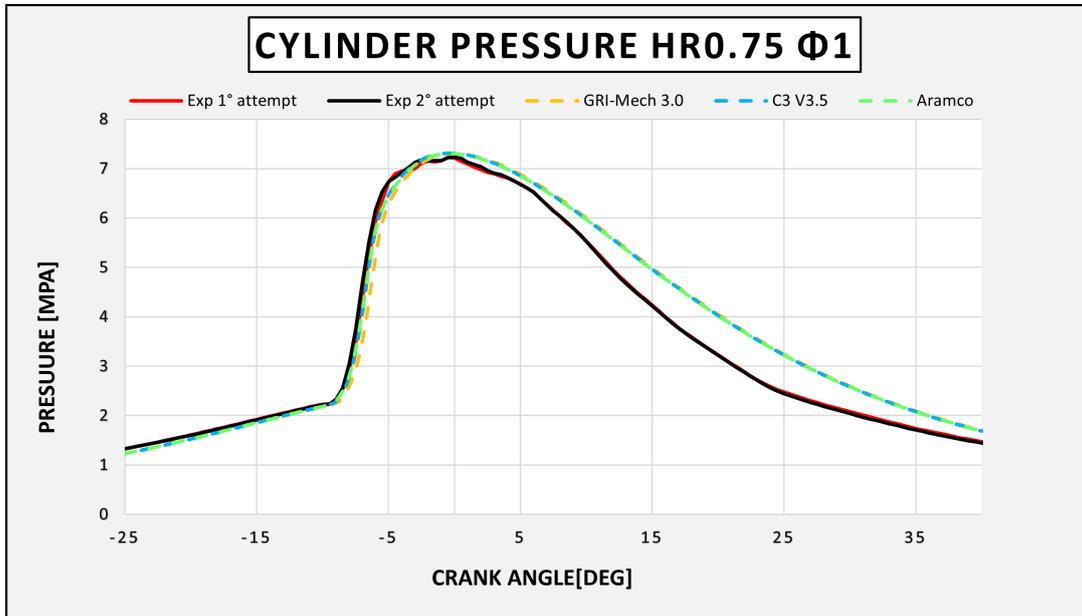


Figura 6.17: Andamento Pressione Cilindro HR0.75,  $\Phi = 1$

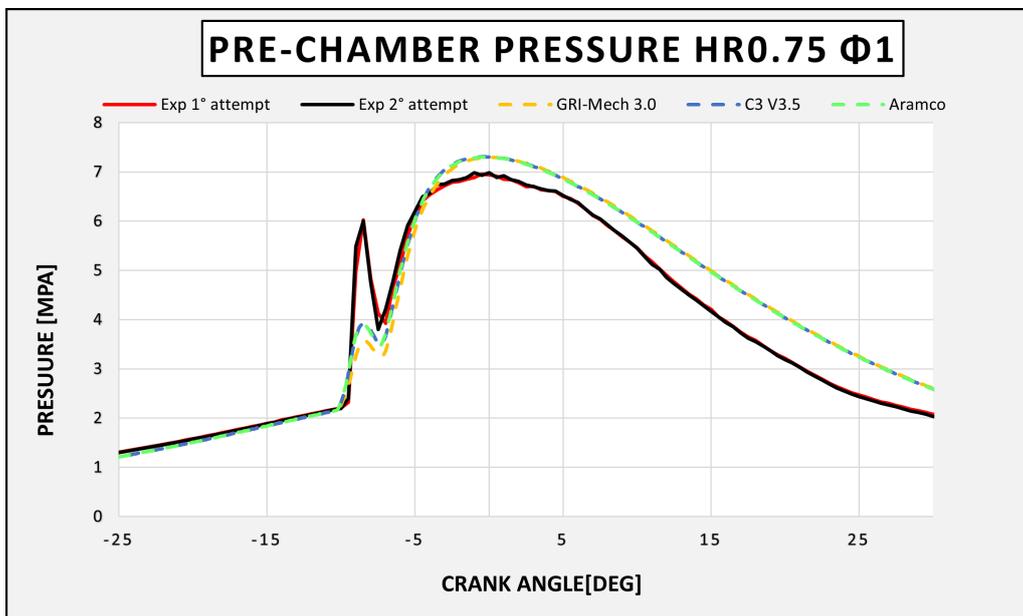


Figura 6.18: Andamento Pressione in pre-camera HR0.75,  $\Phi = 1$

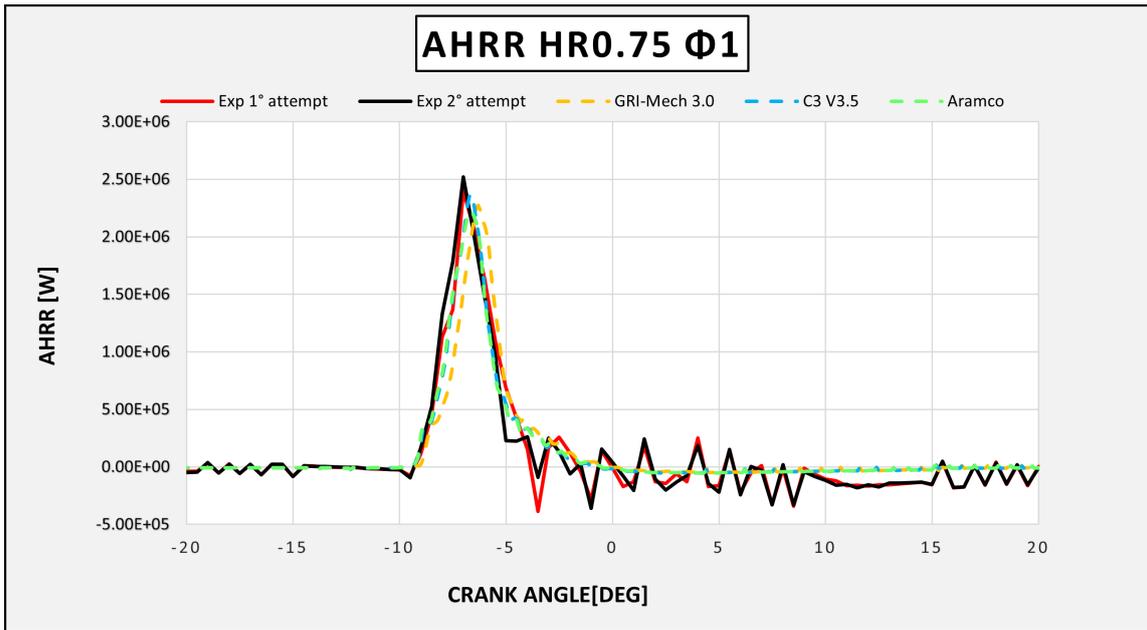


Figura 6.19: Apparent Heat Release Rate HR0.75,  $\Phi = 1$

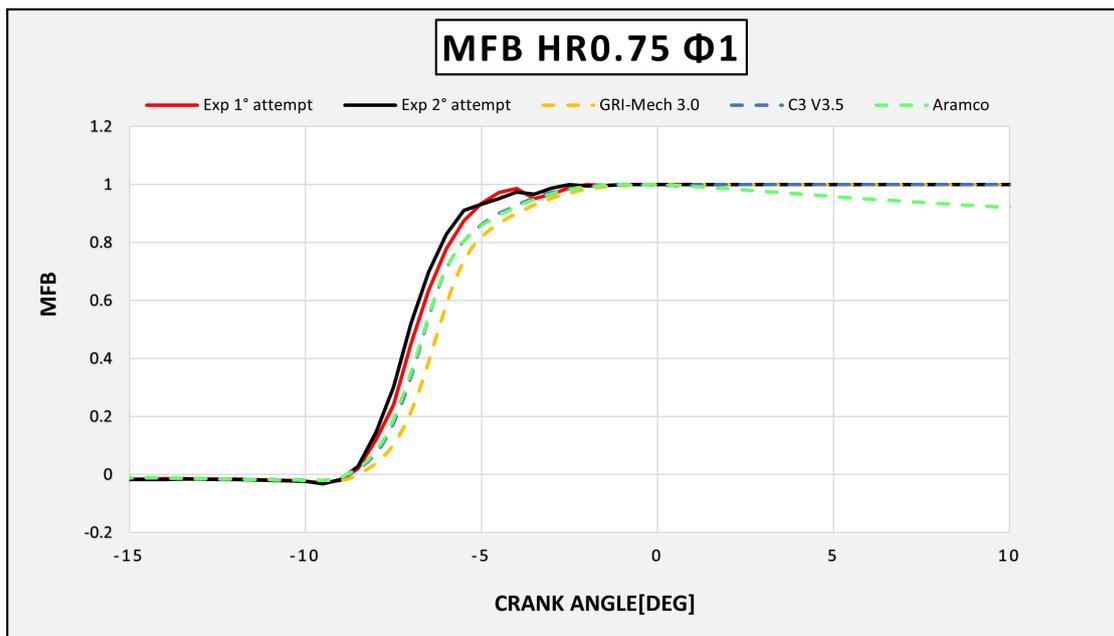


Figura 6.20: Mass Fraction Burned HR0.75,  $\Phi = 0.1$

## 6.6 Risultati caso HR 0.75, $\Phi = 0.625$

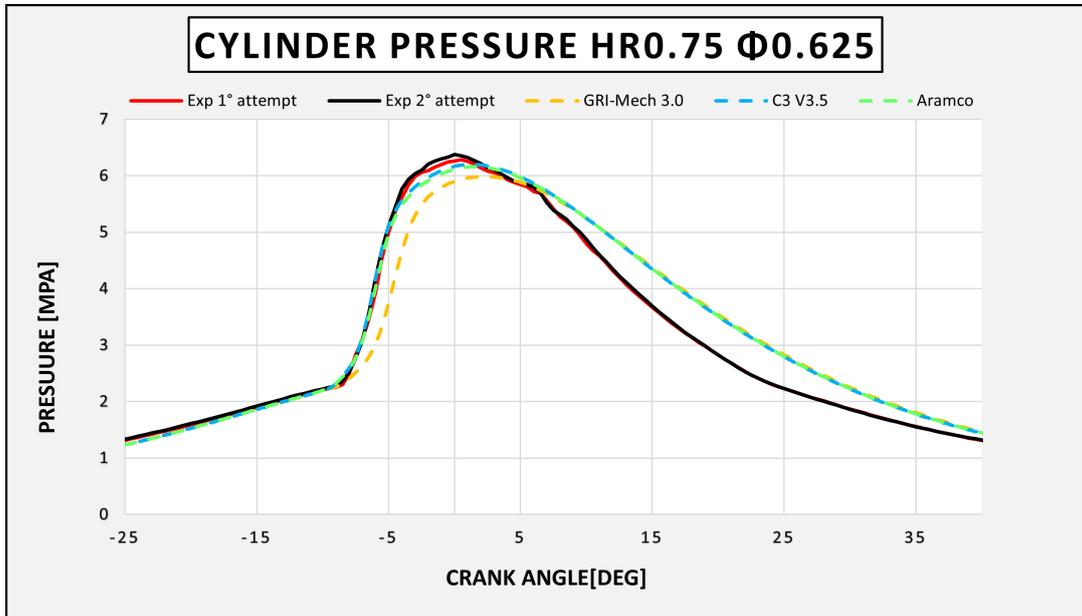


Figura 6.21: Andamento Pressione Cilindro HR0.75,  $\Phi = 0.625$

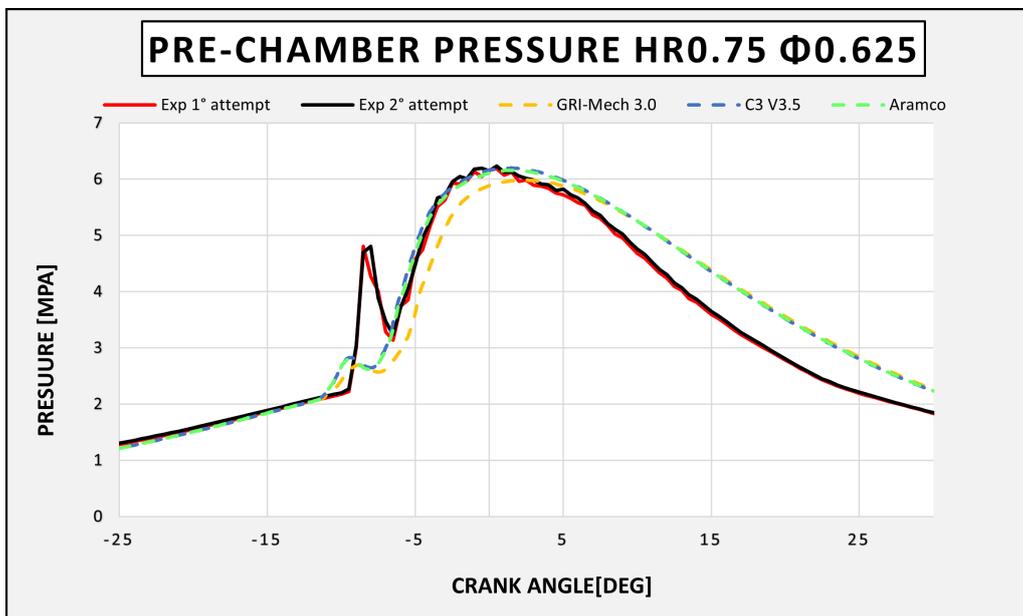


Figura 6.22: Andamento Pressione in pre-camera HR0.75,  $\Phi = 0.625$

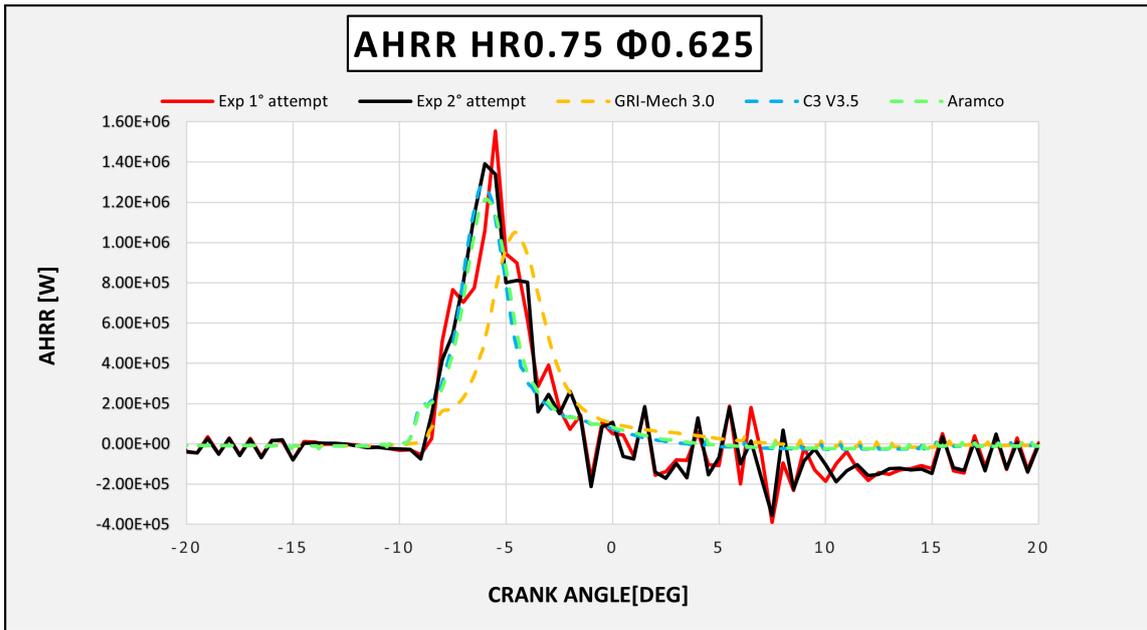


Figura 6.23: Apparent Heat Release Rate HR0.75,  $\Phi = 0.625$

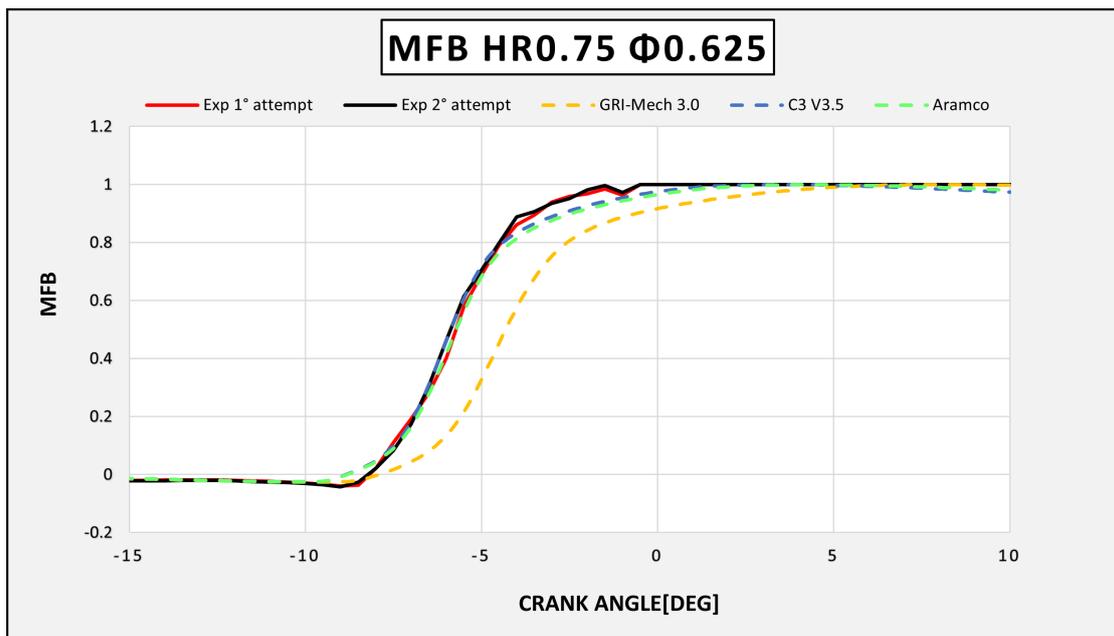


Figura 6.24: Mass Fraction Burned HR0.75,  $\Phi = 0.625$

## 6.7 Risultati caso HR 1, $\Phi = 1$

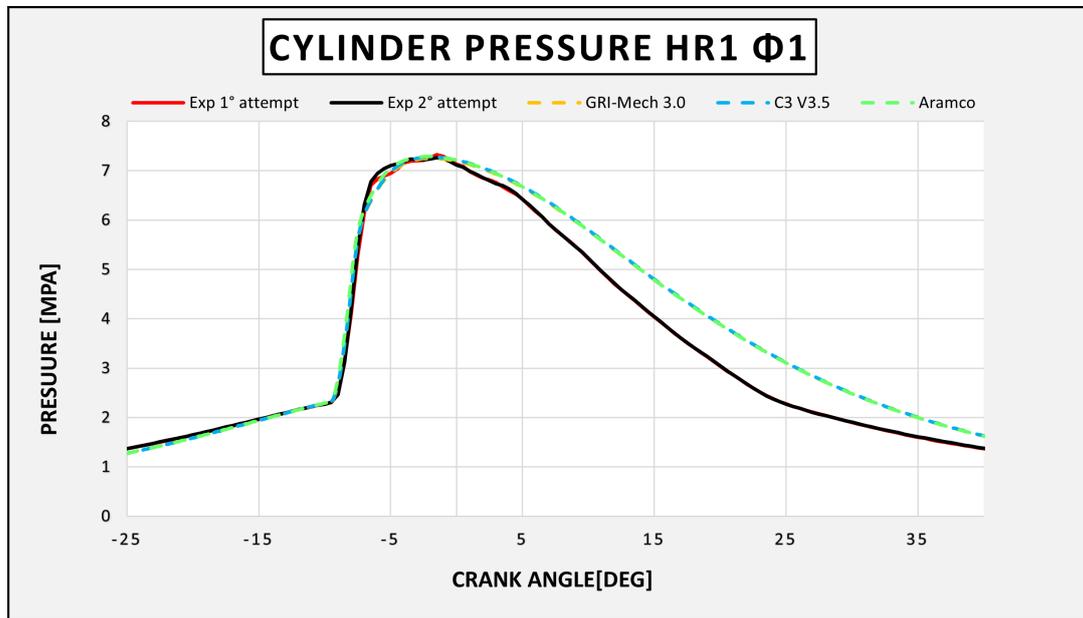


Figura 6.25: Andamento Pressione Cilindro HR1,  $\Phi = 1$

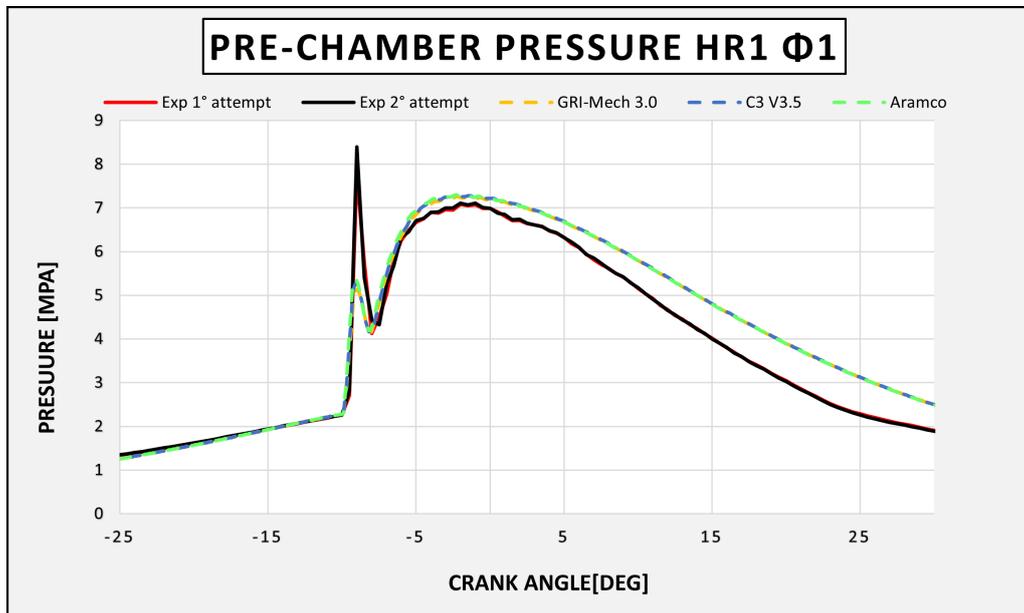


Figura 6.26: Andamento Pressione in pre-camera HR1,  $\Phi = 1$

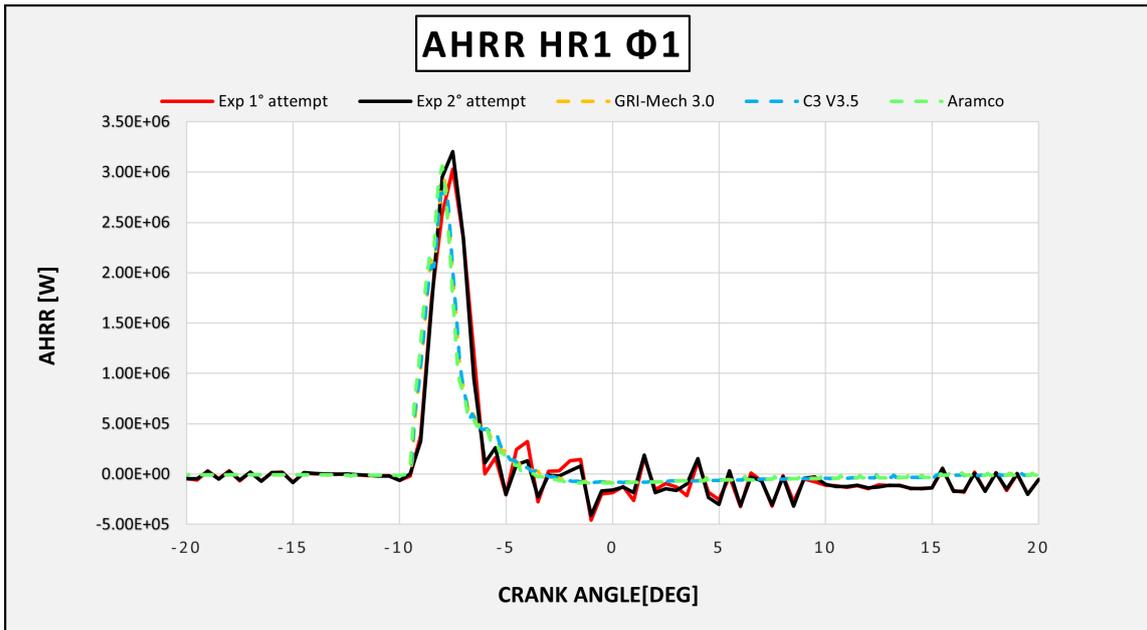


Figura 6.27: Apparent Heat Release Rate HR1,  $\Phi = 1$

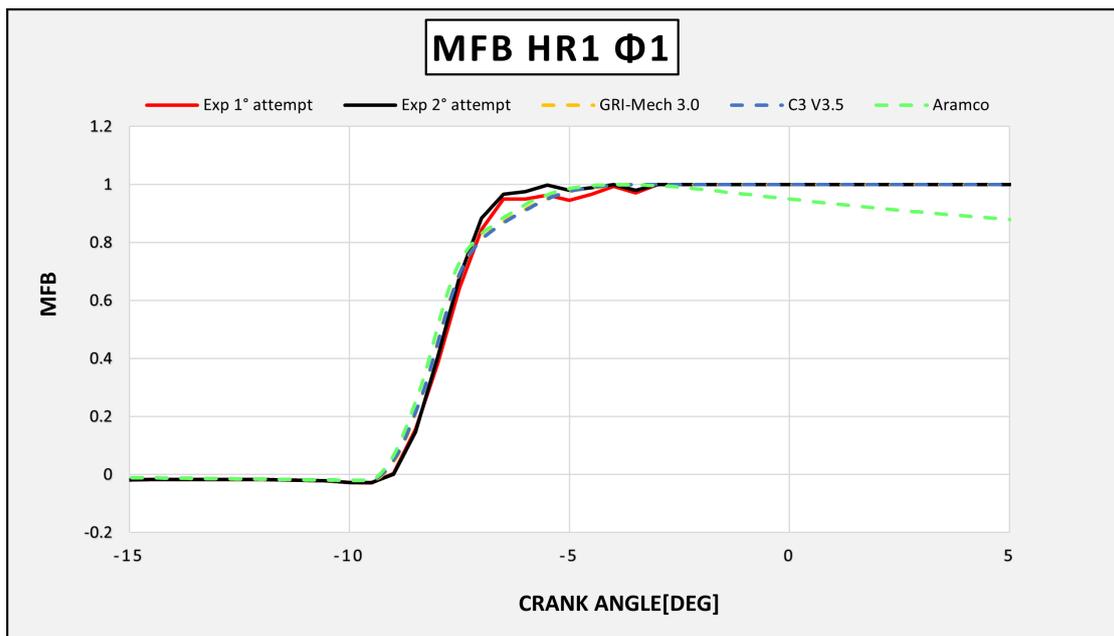


Figura 6.28: Mass Fraction Burned HR1,  $\Phi = 0.1$

## 6.8 Risultati caso HR 0.5, $\Phi = 0.625$

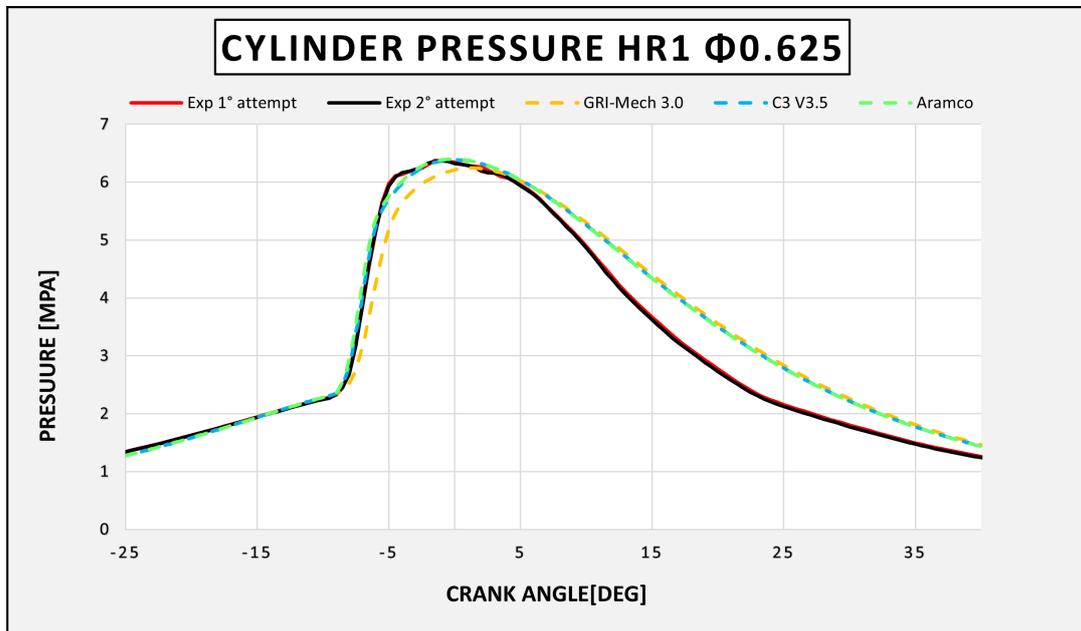


Figura 6.29: Andamento Pressione Cilindro HR1,  $\Phi = 0.625$

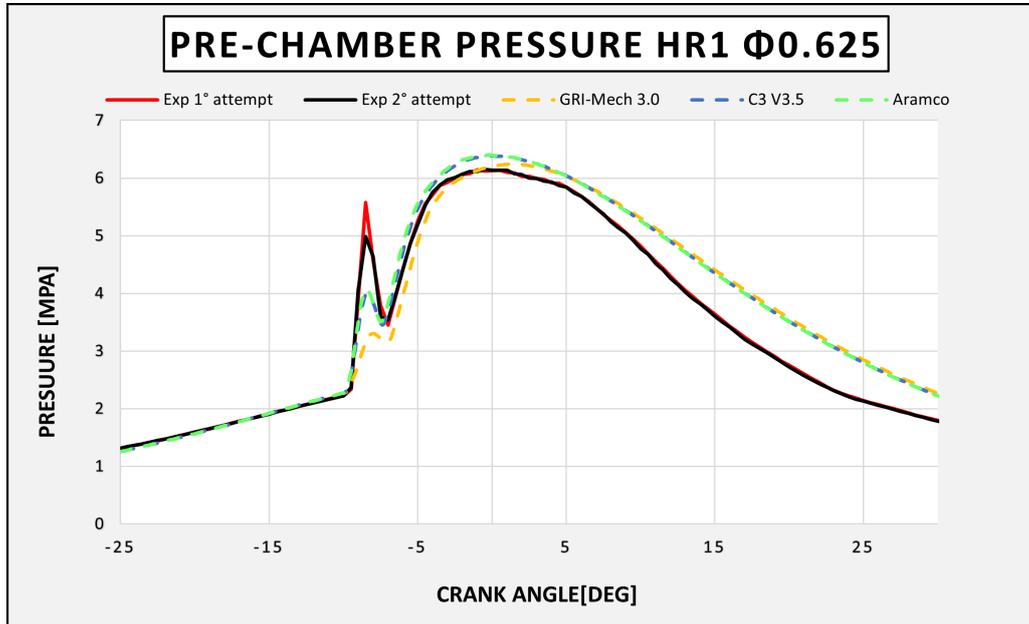


Figura 6.30: Andamento Pressione in pre-camera HR1,  $\Phi = 0.625$

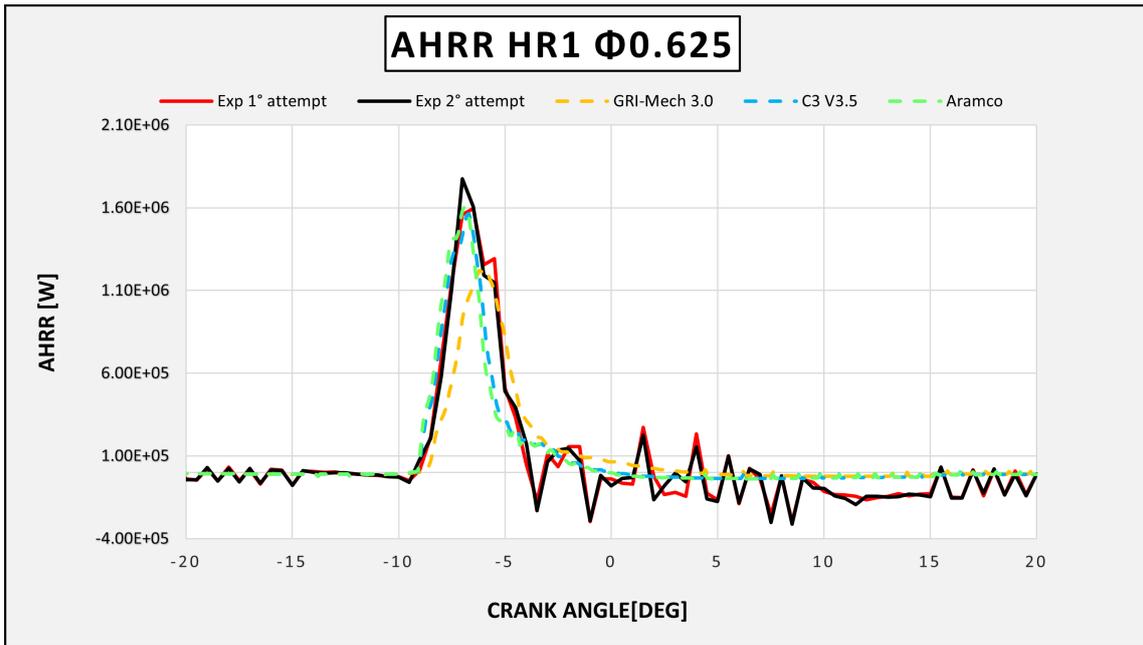


Figura 6.31: Apparent Heat Release Rate HR1,  $\Phi = 0.625$

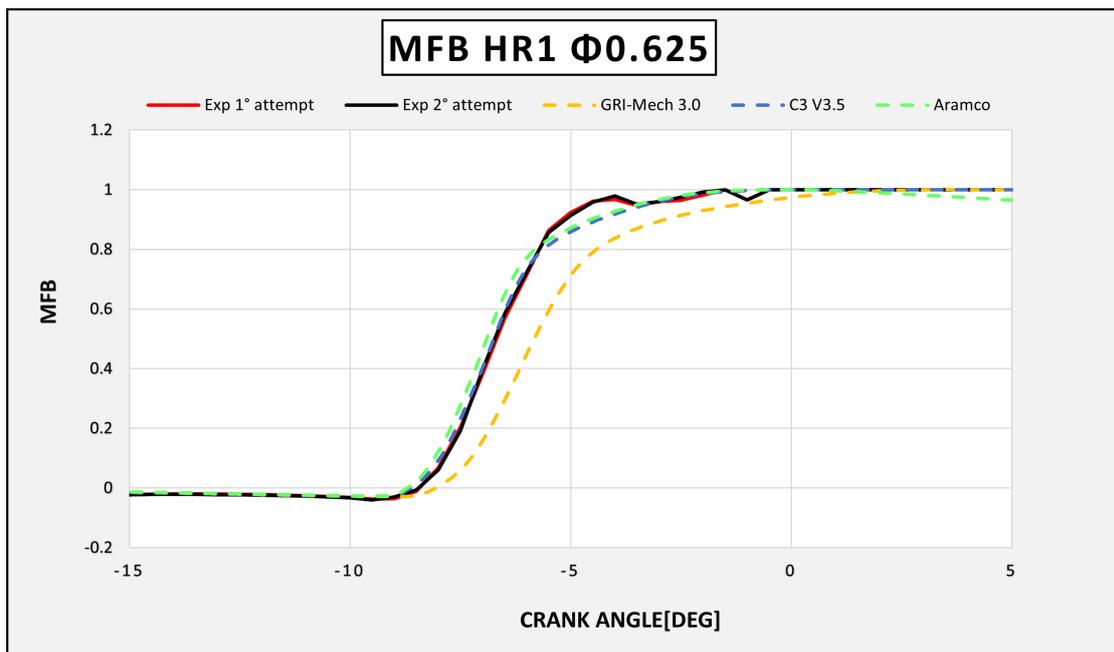


Figura 6.32: Mass Fraction Burned HR1,  $\Phi = 0.625$

## 6.9 Discussione dei risultati 3D

Le simulazioni CFD della combustione realizzate tramite il modello Aramco hanno permesso di analizzare in dettaglio l'evoluzione delle principali grandezze termochimiche durante il processo combustivo.

In particolare, è stato osservato come l'aumento della frazione di idrogeno nella miscela porti a una combustione più rapida, con picchi di temperatura e pressione significativamente più elevati. Il modello ha mostrato una buona sensibilità alle variazioni nella composizione della miscela, permettendo una chiara distinzione tra i comportamenti reattivi delle miscele a prevalenza di metano e di quelle più ricche in idrogeno.

Durante la fase di espansione, si registra un calo di pressione che può essere attribuito principalmente a fenomeni di blow-by. Il fenomeno è chiaramente visibile nelle analisi di pressione in camera e pre-camera. Questo effetto, che altera in modo sensibile le misurazioni sperimentali, è legato sia alla configurazione costruttiva del motore RCEM — ricca di sensori e componenti ausiliari — sia al disegno delle fasce elastiche del pistone, che non assicura una chiusura ermetica ottimale della camera.

Nonostante siano state implementate diverse soluzioni tecniche per contenere tali perdite, come l'isolamento termico e meccanico dei sensori, è stato comunque rilevato un blow-by non trascurabile.

È rilevante precisare, tuttavia, che l'elaborazione dei dati presentata in questo lavoro si concentra esclusivamente su un intervallo angolare ristretto, selezionato in base all'andamento dell'AHRR. Questo consente di escludere dal campo di analisi le zone più soggette a distorsioni dovute alle perdite, rendendo quindi i risultati affidabili e consistenti. Il ricorso alla visualizzazione ottica, inoltre, contribuisce a rafforzare la validità delle osservazioni.

L'analisi sulla frazione di massa bruciata (MFB), fornisce indicazioni più dettagliate sullo sviluppo della combustione, risultando particolarmente utile per la validazione del modello CFD. Come per l'AHRR, anche in questo caso l'indice MFB si concentra sulle dinamiche effettive della combustione, riducendo al minimo l'influenza del rumore generato da fenomeni secondari come il blow-by.

Un ulteriore punto di forza dello studio è rappresentato dal confronto diretto tra i dati numerici e quelli sperimentali, che ha confermato la validità del modello Aramco nella riproduzione dell'andamento osservato della velocità di fiamma laminare. Questo confronto ha contribuito a validare in parte le simulazioni effettuate, rafforzando la credibilità del modello numerico adottato.

Tuttavia, pur producendo risultati complessivamente soddisfacenti, il modello Aramco mostra una maggiore accuratezza in condizioni ricche, mentre in quelle magre — soprattutto con basse percentuali di idrogeno nella miscela — fatica a replicare fedelmente i dati sperimentali. Questo limite è particolarmente evidente nell'analisi della pressione in precamera, dove il modello non riesce a raggiungere i picchi di pressione osservati sperimentalmente e richiede un anticipo della fase di saturazione (in gradi manovella) per ottenere un buon allineamento temporale con i picchi reali. Queste discrepanze possono essere attribuite ad una leggera instabilità nel modello cinetico che può portare a delle imprecisioni, soprattutto in campo magro dove le ricerche e dati sperimentali di riferimento sono inferiori. D'altro canto, le previsioni

relative all'Apparent Heat Release Rate (AHRR) e al Mass Fraction Burned (MFB) risultano molto più fedeli ai dati sperimentali, a conferma della bontà del modello.

In sintesi, la metodologia CFD sviluppata si è dimostrata efficace nel descrivere l'interazione tra composizione della miscela e comportamento della fiamma, fornendo uno strumento utile per l'ottimizzazione dei parametri operativi in motori alimentati da combustibili alternativi, con una buona corrispondenza rispetto ai risultati sperimentali, in particolare nelle condizioni più ricche e con frazioni crescenti di idrogeno.

## 6.10 Analisi comparativa delle immagini ottiche e simulate

In questo capitolo vengono presentate le immagini acquisite tramite il sensore ottico installato sulla Rapid Compression Expansion Machine (RCEM), relative a diversi casi di studio. Le immagini mostrano l'evoluzione del processo di combustione in corrispondenza di specifici angoli di manovella, scelti per rappresentare momenti significativi della fase di combustione.

Per ciascun caso, le immagini sperimentali saranno confrontate con le immagini corrispondenti ottenute dalle simulazioni CFD, elaborate tramite Tecplot, l'estensione grafica di Converge Studio utilizzata per la post-elaborazione dei risultati. Questo confronto ha lo scopo di valutare la coerenza tra il comportamento reale del fronte di fiamma, rilevato sperimentalmente, e quello previsto dal modello numerico.

Le immagini ricavate da Tecplot sono state estratte agli stessi angoli di manovella delle immagini ottiche, al fine di garantire un confronto diretto e significativo tra i due approcci, tranne la prima riga, dove le immagini numeriche sono state scelte per evidenziare il momento di uscita del getto di fiamma, utile a mostrare le discrepanze temporali tra i casi.

Le seguenti sezioni illustrano, per ogni caso analizzato, l'evoluzione della fiamma nel tempo, evidenziando similarità e discrepanze tra esperimento e simulazione.

CAPITOLO 6. RISULTATI SIMULAZIONI 3D DI COMBUSTIONE CON MODELLO ARAMCO

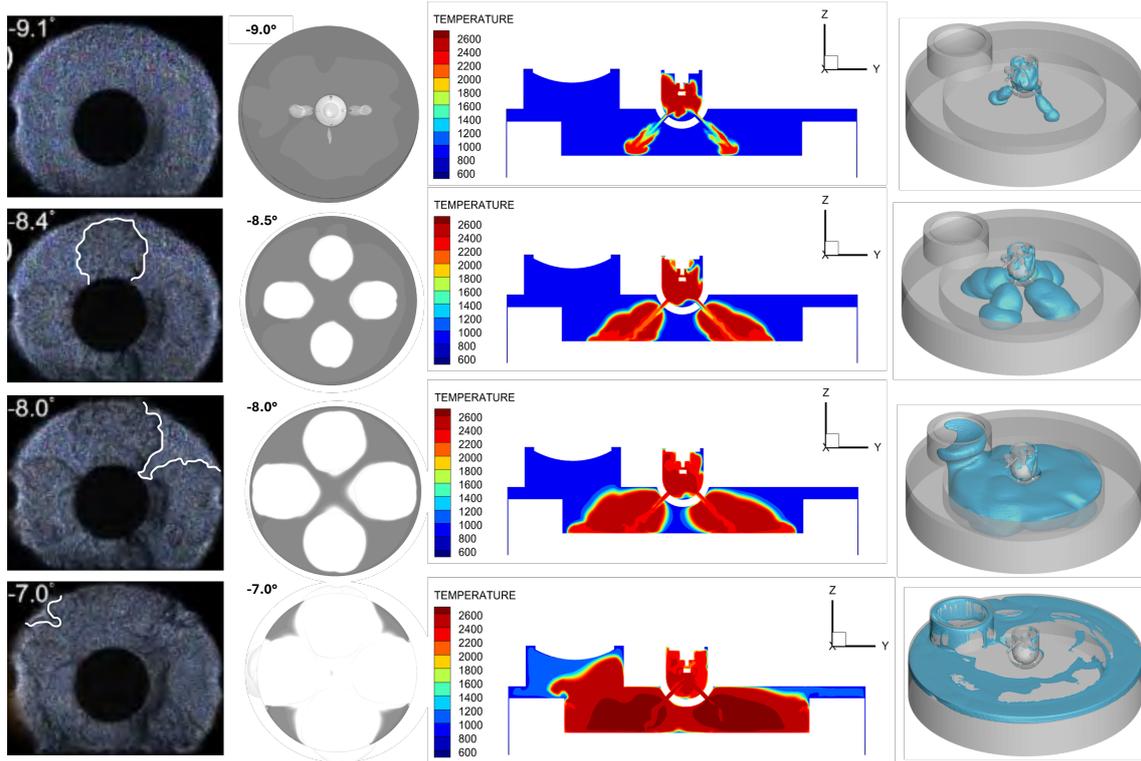


Figura 6.33: Analisi comparativa HR1,  $\Phi = 0.625$

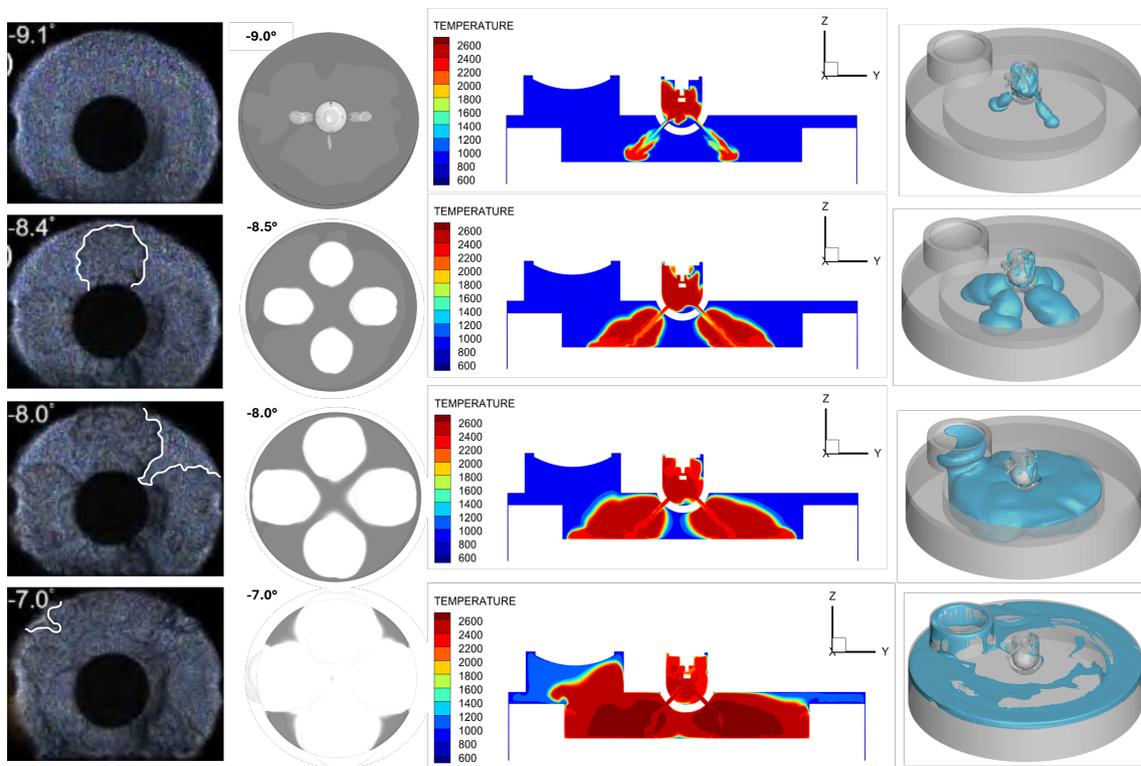


Figura 6.34: Analisi comparativa HR1,  $\Phi = 0.625$

CAPITOLO 6. RISULTATI SIMULAZIONI 3D DI COMBUSTIONE CON MODELLO ARAMCO

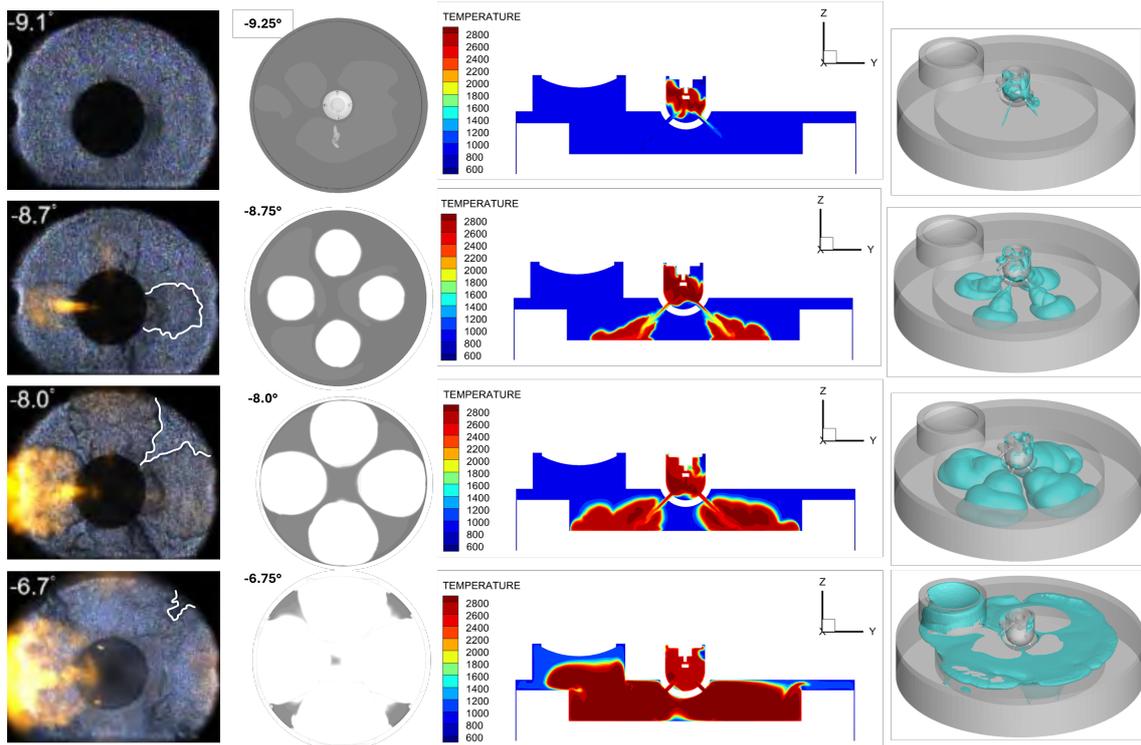


Figura 6.35: Analisi comparativa HR0.75,  $\Phi = 1$

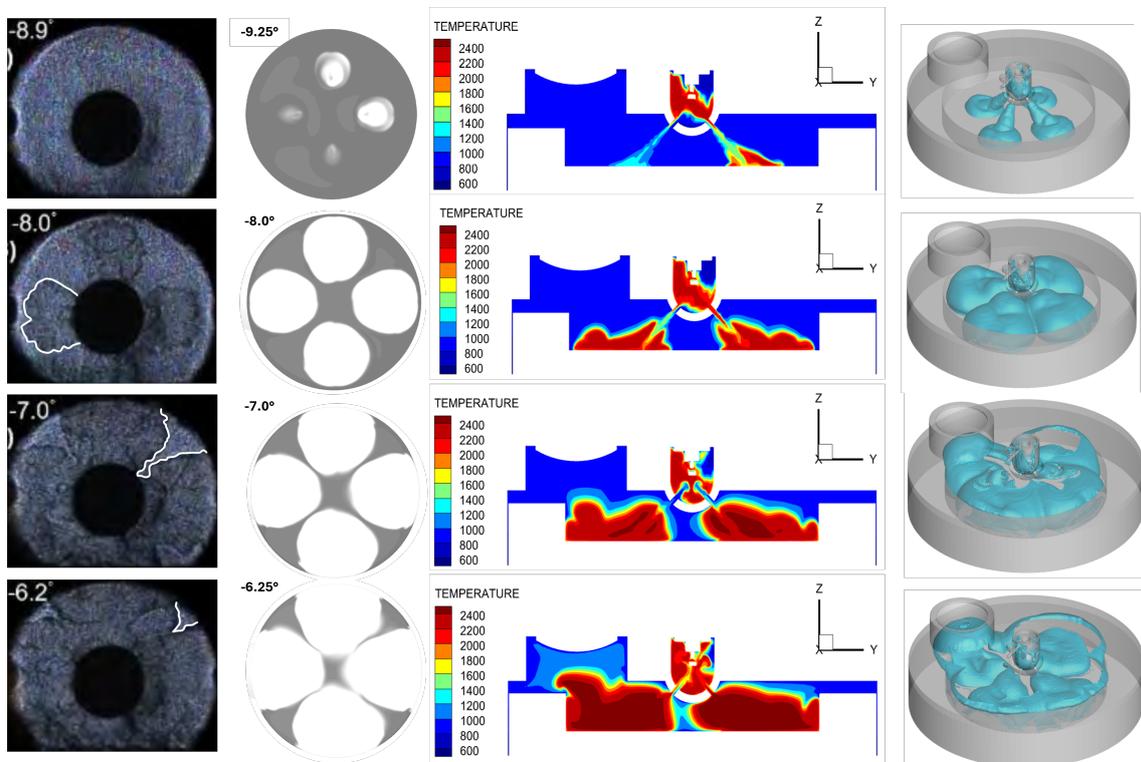


Figura 6.36: Analisi comparativa HR0.75,  $\Phi = 0.625$

CAPITOLO 6. RISULTATI SIMULAZIONI 3D DI COMBUSTIONE CON MODELLO ARAMCO

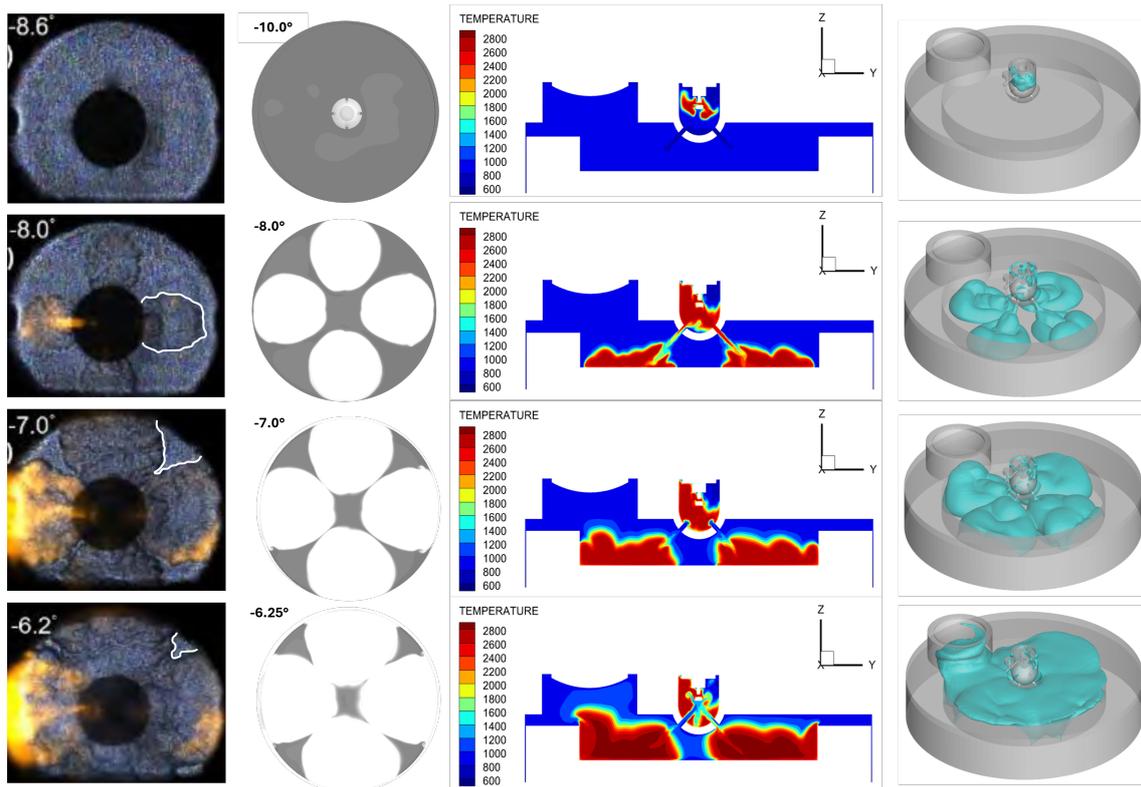


Figura 6.37: Analisi comparativa HR0.5,  $\Phi = 1$

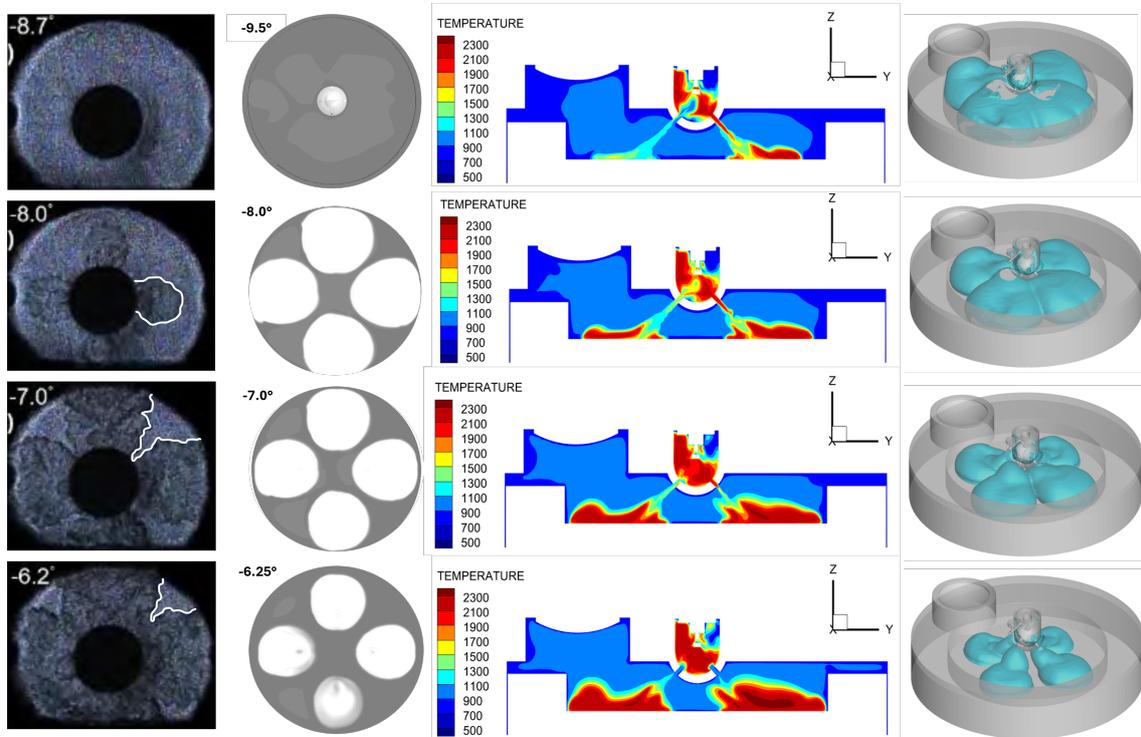


Figura 6.38: Analisi comparativa HR0.5,  $\Phi = 0.625$

CAPITOLO 6. RISULTATI SIMULAZIONI 3D DI COMBUSTIONE CON MODELLO ARAMCO

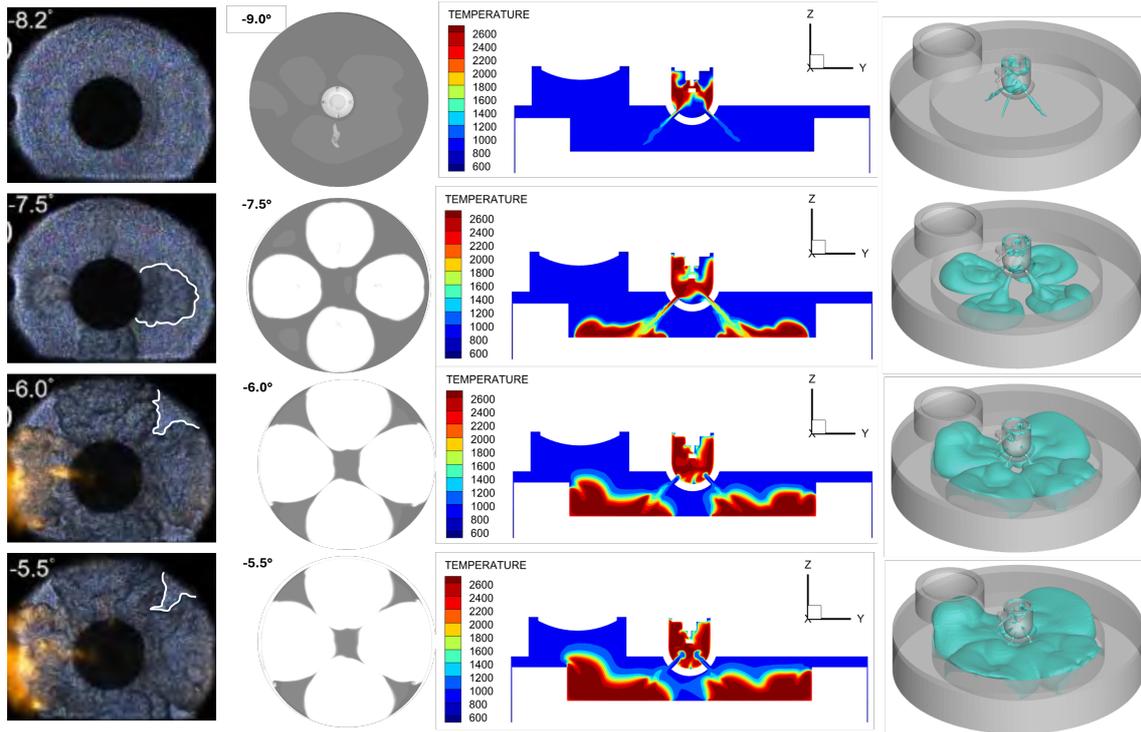


Figura 6.39: Analisi comparativa HR0.25,  $\Phi = 1$

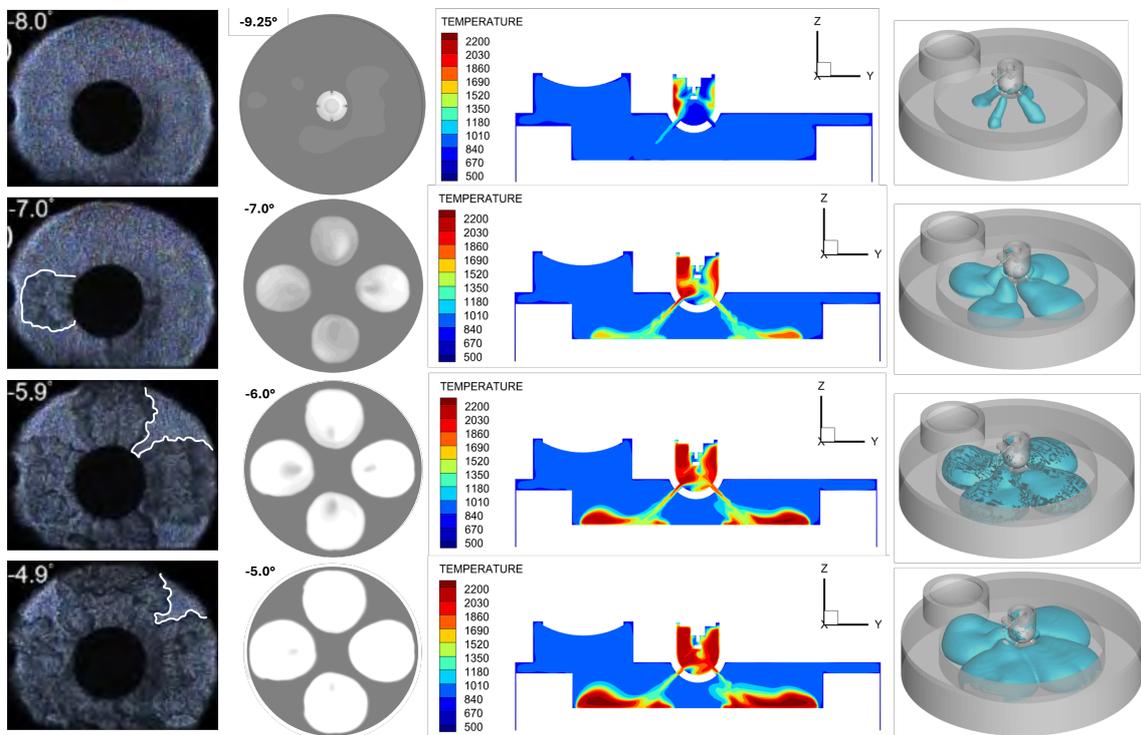


Figura 6.40: Analisi comparativa HR0.25,  $\Phi = 0.625$

L'analisi comparativa tra immagini ottiche acquisite sperimentalmente e i risultati ottenuti dalle simulazioni numeriche rappresenta un elemento cruciale per valutare l'affidabilità e la capacità predittiva del modello CFD implementato.

Nel presente lavoro, le immagini ottiche, ottenute da acquisizioni ad alta velocità durante la combustione all'interno del RCEM, sono state confrontate con le corrispondenti istantanee di temperatura e frazione di radicali OH predette dalla simulazione. Il confronto ha evidenziato una buona coerenza qualitativa per quanto riguarda l'estensione spaziale della zona di reazione e la posizione del fronte di fiamma.

Tuttavia, si osservano alcune discrepanze, in particolare:

- Le immagini simulate mostrano una maggiore regolarità e simmetria nella propagazione del fronte di fiamma rispetto a quanto rilevato sperimentalmente. Ciò è attribuibile alla natura assialmente simmetrica del dominio e alla modellazione bidimensionale, che non può catturare le fluttuazioni e le asimmetrie naturali presenti nel flusso reale.
- La brillantezza e l'intensità della radiazione nelle immagini ottiche sperimentali, correlate alla presenza di specie eccitate e di fuliggine, non sono completamente riprodotte nella simulazione, che si limita a tracciare la distribuzione del radicale OH e della temperatura. L'introduzione futura di modelli di emissione ottica o di traccianti virtuali potrebbe migliorare questo aspetto.
- Alcune differenze nei tempi di accensione e nella forma del fronte di fiamma possono essere influenzate da imperfezioni nell'allineamento temporale tra i due dataset e dalla sensibilità delle condizioni iniziali (temperatura, pressione, composizione).

In sintesi, l'analisi ha confermato che il modello è in grado di descrivere qualitativamente i principali fenomeni osservati sperimentalmente. Tuttavia, l'assenza di fluttuazioni tridimensionali e la semplificazione geometrica limitano la possibilità di un confronto quantitativo rigoroso. Nonostante ciò, il confronto visivo rappresenta un valido strumento per individuare tendenze generali, per verificare la coerenza fisica del modello e per guidare future ottimizzazioni del setup numerico.

Ulteriori miglioramenti dell'analisi comparativa potranno includere:

- La trasformazione delle immagini ottiche in mappe pseudocolore di intensità, da confrontare con campi scalari simulati (temperatura, specie attive).
- L'applicazione di metriche quantitative (es. correlazione incrociata, errori pixel-wise) per rafforzare il confronto.
- L'estensione dell'analisi a più istanti temporali e condizioni operative.

## 7 Conclusioni e sviluppi futuri

Il presente lavoro ha permesso di simulare il comportamento di una carica reattiva in un motore RCEM, studiando le influenze della composizione della miscela, delle condizioni iniziali e del modello chimico sulla velocità di fiamma laminare. Le simulazioni sono state eseguite impiegando un modello RANS (RNG  $k-\varepsilon$ ) e un meccanismo cinetico dettagliato (AramcoMech), con validazione sperimentale dei risultati. Gli esiti sono stati ottimi, grazie ad un modello predittivo che ha rispecchiato i dati sperimentali anche se con un pò di fatica in condizioni magre. Le leggere incongruenze in espansione sono state giustificate da un rilevabile fenomeno di blow-by che però non ha minato l'affidabilità del modello.

Per ampliare ulteriormente la portata e l'accuratezza dello studio, si propongono alcuni possibili sviluppi futuri.

Un primo possibile sviluppo futuro consiste nell'adozione di modelli alternativi di stretch turbolento per la descrizione dell'interazione turbolenza-chimica, in sostituzione del modello ITNFS utilizzato in questa tesi. In particolare, potrebbe risultare interessante valutare l'impiego di modelli più recenti o avanzati, al fine di migliorare l'accuratezza nella previsione dell'interazione tra turbolenza e fronte di fiamma, soprattutto in condizioni ad alto numero di Reynolds e in presenza di forti gradienti di miscelazione. Interessante sarebbe anche capire come il parametro  $\alpha$  si interfacci ai nuovi modelli e se sia doveroso apportare consistenti calibrazioni del parametro. Un confronto sistematico tra diversi modelli consentirebbe inoltre di valutare l'impatto di tali scelte modellistiche sui principali parametri prestazionali del motore e sulla predizione delle emissioni.

Un altro passo potrebbe consistere nell'adozione di modelli di turbolenza avanzati, come le simulazioni LES (Large Eddy Simulation), che consentono una descrizione più dettagliata e fisicamente accurata delle strutture turbolente. In alternativa, modelli ibridi RANS-LES (come DES o DDES) potrebbero offrire un buon compromesso tra precisione e costi computazionali, soprattutto in presenza di fenomeni transitori complessi.

# Bibliografia

- [1] Rafael Lago Sari et al. *Hydrogen Internal Combustion Engine Strategies for Heavy-Duty Transportation: Engine and System Level Perspective*. URL: [https://www.researchgate.net/publication/377437003\\_Hydrogen\\_Internal\\_Combustion\\_Engine\\_Strategies\\_for\\_Heavy-Duty\\_Transportation\\_Engine\\_and\\_System\\_Level\\_Perspective](https://www.researchgate.net/publication/377437003_Hydrogen_Internal_Combustion_Engine_Strategies_for_Heavy-Duty_Transportation_Engine_and_System_Level_Perspective).
- [2] Zbigniew Stępień. *A Comprehensive Overview of Hydrogen-Fueled Internal Combustion Engines: Achievements and Future Challenges*. URL: <https://www.mdpi.com/1996-1073/14/20/6504>.
- [3] Taggart Durrant. *Computational Fluid Dynamics (CFD) - A Gentle Introduction*. URL: <https://www.theoverview.org/p/computational-fluid-dynamics-cfd>.
- [4] Alpesh Bhimji Chawdhary Prathmesh Rajendra Jagadale. *Computational Fluid Dynamics, An Overview*. URL: [https://www.researchgate.net/publication/358234935\\_Computational\\_Fluid\\_Dynamics\\_An\\_Overview](https://www.researchgate.net/publication/358234935_Computational_Fluid_Dynamics_An_Overview).
- [5] Daniela Misul Riccardo Sola Mirko Baratta. *Premixed Hydrogen-Methane Combustion Modelling in a Pre-Chamber RCEM with Flamelet-Based and Detailed-Chemistry*. URL: <https://www.sae.org/publications/technical-papers/content/2025-24-0046/>.
- [6] O Colin et al. *3D Modeling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines*. URL: [https://www.researchgate.net/publication/245277567\\_3d\\_Modeling\\_of\\_Mixing\\_Ignition\\_and\\_Combustion\\_Phenomena\\_in\\_Highly\\_Stratified\\_Gasoline\\_Engines](https://www.researchgate.net/publication/245277567_3d_Modeling_of_Mixing_Ignition_and_Combustion_Phenomena_in_Highly_Stratified_Gasoline_Engines).
- [7] Olivier Colin Edouard Suillaud Karine Truffin. *Direct Numerical Simulations of high Karlovitz number premixed flames for the analysis and modeling of the displacement speed*. 2022.
- [8] F.Charlette et al. *A Power-Law Flame Wrinkling Model for LES of Premixed Turbulent Combustion*.
- [9] C. Meneveau e T. Poinso. *Stretching and Quenching of Flamelets in Premixed Turbulent Combustion*. Combustion and flame 86, Article No. 311-332. 1991.
- [10] M. Metghalchi e J.C. Keck. *Burning Velocities of Mixtures of Air and Methanol, Isooctane and Indolene at High Pressures and Temperatures*. 1982.
- [11] O.L. Gulder. *Correlations of Laminar Combustion Data for Alternative S.I. Engine Fuels*. Volume SAE Paper, Article No. 841000. 1984.

- [12] Gregory P. Smith et al. *GRI-Mech model*. [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/). 1999.
- [13] K. Narayanaswamy, H. Pitsch e P. Pepiot. “A component library framework for deriving kinetic mechanisms for multi-component fuel surrogates: application for jet fuel surrogates”. In: *Combustion and Flame* 165 (2016), pp. 288–309. DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.12.013. URL: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2015.12.013>.
- [14] Shijun Dong e coauthors. “A new detailed kinetic model for surrogate fuels: C3MechV3.3”. In: ().