



POLITECNICO DI TORINO

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica

Tesi di Laurea Magistrale

Studio CFD della combustione di miscele idrogeno e ammoniaca in un motore SI con ECFM in CONVERGE: calibrazione del modello al variare della percentuale di idrogeno

Relatori:

Prof. Mirko Baratta

Prof.ssa Daniela Anna Misul

Candidato:

Francesco Pellegrino

Correlatore:

Dott. Riccardo Sola

Anno Accademico 2024/2025

Sommario

Indice delle figure	5
Abstract	8
Introduzione	9
1 Allestimento sperimentale	11
1.1 Descrizione del banco prova	11
1.2 Condizioni operative	12
2 Modellazione della combustione premiscelata	14
2.1 Processi fondamentali della combustione	14
2.2 Struttura e parametri caratteristici del fronte di fiamma	15
2.3 Regimi di combustione turbolenta: il diagramma di Borghi–Peters	19
3 Modellazione numerica della combustione	23
3.1 Approcci disponibili in CFD	24
3.2 Modello ECFM	24
3.2.1 Equazione di trasporto	27
3.3 Effetti di flame stretch e proprietà diffusivo-termiche	29
4 Modellazione numerica della turbolenza	32
4.1 Approccio RANS (Reynolds Averaged Navier–Stokes)	33
4.1.1 Modello RANS RNG $k - \epsilon$	34
5 Configurazione del modello di simulazione	36
5.1 Condizioni al contorno e iniziali	37
5.2 Configurazione della mesh	39
5.3 Modello di accensione e calibrazione di α_{stretch}	41
6 Analisi delle simulazioni 3D	42
6.1 Simulazioni con $\Phi = 1$	44

6.1.1	Caso 117 – Miscela con 0% di H ₂	44
6.1.2	Caso 124 – Miscela con 5% di H ₂	47
6.1.3	Caso 131 – Miscela con 10% di H ₂	50
6.1.4	Caso 138 – Miscela con 19% di H ₂	53
6.1.5	Caso 145 – Miscela con 40% di H ₂	56
6.1.6	Caso 152 – Miscela con 60% di H ₂	59
6.2	Simulazioni con $\Phi = 0.8$	62
6.2.1	Caso 122 – Miscela con 5% di H ₂	62
6.2.2	Caso 129 – Miscela con 10% di H ₂	65
6.2.3	Caso 136 – Miscela con 20% di H ₂	68
6.2.4	Caso 143 – Miscela con 40% di H ₂	71
6.2.5	Caso 150 – Miscela con 60% di H ₂	74
6.3	Discussione risultati	77
7	Conclusioni e sviluppi futuri	85
	Riferimenti bibliografici	87

Indice delle figure

Figura 1, setup sperimentale.....	12
Figura 2, struttura di una fiamma premiscelata: (a) profili in una fiamma laminare premiscelata, (b) rappresentazioni successive del fronte di una fiamma premiscelata turbolenta	16
Figura 3, struttura della fiamma turbolenta in un motore ad accensione comandata	16
Figura 4, schema di un getto creato dal flusso attraverso la valvola di aspirazione e relativa struttura turbolenta derivante.....	18
Figura 5, diagramma di Borghi-Peters che rappresenta i diversi regimi di una combustione premiscelata turbolenta, tratto dal lavoro di N.Peters del 1986.....	20
Figura 6, diagramma di Borghi-Peters aggiornato da N.Peters nel 1999	20
Figura 7, DNS di un regime (a) wrinkled flamelet, (b) thickened-wrinkled flame	22
Figura 8, campo della variabile di progresso $\tilde{c}$ in una sezione 2D di un dominio.....	25
Figura 9, schema della decomposizione bimodale adottata nel modello ECFM.....	26
Figura 10, effetti dello stretch su un fronte di fiamma laminare con $Le > 1$	30
Figura 11, effetti dello stretch su un fronte di fiamma laminare con $Le < 1$	31
Figura 12, differenze dei tre diversi approcci di modellazione CFD applicati a un getto turbolento.....	33
Figura 13, geometria 3D del motore utilizzato per le simulazioni CFD	36
Figura 14, sezione della geometria del motore EP6DT importata in CONVERGE, con evidenziata l'assegnazione delle superfici alle boundary e dei volumi alle region.....	38
Figura 15, particolare del raffinamento statico attorno alla candela	40
Figura 16, livello massimo di raffinamento della mesh raggiunto in ogni cella in camera di combustione in (a) a -50° CA, (b) a 0° CA e (c) a 20° CA	41
Figura 17, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$	44
Figura 18, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$	45
Figura 19, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$	45
Figura 20, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$	46
Figura 21, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 1$	47
Figura 22, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 1$	48
Figura 23, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 1$	48
Figura 24, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 1$	49

Figura 25, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 1$	50
Figura 26, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 1$	51
Figura 27, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 1$	51
Figura 28, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 1$	52
Figura 29, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =19%, $\Phi = 1$	53
Figura 30, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =19%, $\Phi = 1$	54
Figura 31, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =19%, $\Phi = 1$	54
Figura 32, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =19%, $\Phi = 1$	55
Figura 33, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 1$	56
Figura 34, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 1$	57
Figura 35, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 1$	57
Figura 36, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 1$	58
Figura 37, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 1$	59
Figura 38, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 1$	60
Figura 39, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 1$	60
Figura 40, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 1$	61
Figura 41, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =5%, $\Phi = 0.8$	62
Figura 42, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =5%, $\Phi = 0.8$	63
Figura 43, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =5%, $\Phi = 0.8$	63
Figura 44, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =5%, $\Phi = 0.8$	64
Figura 45, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 0.8$	65
Figura 46, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 0.8$	66
Figura 47, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 0.8$	66
Figura 48, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =10%, $\Phi = 0.8$	67
Figura 49, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =20%, $\Phi = 0.8$	68
Figura 50, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =20%, $\Phi = 0.8$	69
Figura 51, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =20%, $\Phi = 0.8$	69
Figura 52, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =20%, $\Phi = 0.8$	70
Figura 53, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 0.8$	71
Figura 54, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 0.8$	72
Figura 55, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 0.8$	72
Figura 56, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =40%, $\Phi = 0.8$	73
Figura 57, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 0.8$	74

Figura 58, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 0.8$	75
Figura 59, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 0.8$	75
Figura 60, diagramma di Borghi-Peters, Caso con %H ₂ =60%, $\Phi = 0.8$	76
Figura 61, variazione del parametro di calibrazione $\alpha_{stretch}$ in funzione della percentuale di idrogeno a $\Phi=1$ e $\Phi=0.8$	77
Figura 62, pressione in camera, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=1$	79
Figura 63, pressione in camera, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=0.8$	79
Figura 64, Apparent Heat Release Rate, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=1$...	80
Figura 65, Apparent Heat Release Rate, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=0.8$	81
Figura 66, confronto tra risultati sperimentali e numerici ai diversi stadi di combustione (MFB10, MFB50, MFB90) per due percentuali di idrogeno (5% e 60%) a $\Phi=1$	82
Figura 67, diagramma Borghi-Peters per punti operativi a $\Phi=1$	83
Figura 68, diagramma Borghi-Peters per punti operativi a $\Phi=0.8$	84

Abstract

Il presente lavoro di tesi nasce dall'interesse per le potenzialità dei combustibili alternativi e analizza in particolare la combustione di miscele ammoniacale/idrogeno in un motore ad accensione comandata, mediante simulazioni CFD con il software CONVERGE. L'obiettivo principale è valutare il potenziale di questi combustibili *carbon-free*, con particolare attenzione all'influenza della percentuale di idrogeno sul processo di accensione, propagazione della fiamma e stabilità di combustione. Dopo aver acquisito i dati sperimentali dal motore monocilindrico PSA EP6DT, sono state eseguite le simulazioni 3D adottando il modello di combustione ECFM e turbolenza RANS RNG $k - \varepsilon$, calibrando il parametro α_{stretch} al fine di riprodurre i dati sperimentali. I risultati mostrano che il modello numerico è in grado di predire correttamente l'andamento della combustione con delle discrepanze che diventano leggermente più evidenti alle concentrazioni più elevate, facendo comunque rimanere l'accordo con i dati sperimentali complessivamente buono. È stato inoltre osservato che il parametro α_{stretch} cresce con l'aumento della quota di idrogeno pur mantenendosi in un intervallo ridotto (0,03 – 0,12), valori che si riferiscono alle simulazioni condotte in questo lavoro e che coprono un ampio spettro di miscele (0 – 60% H₂, con $\Phi = 1$), a conferma della stabilità e della robustezza della calibrazione.

I risultati confermano la validità dell'approccio numerico nella descrizione della combustione di miscele di ammoniacale e idrogeno, evidenziando proprio come quest'ultimo, per via della sua elevata reattività, rivesta un ruolo centrale nell'ottimizzazione delle prestazioni e nell'implementazione di soluzioni di combustione sostenibili e a ridotto impatto di CO₂.

Introduzione

Negli ultimi decenni i motori a combustione interna hanno avuto un ruolo determinante per lo sviluppo dell'economia globale, ma l'uso intensivo di combustibili fossili per alimentarli ha portato a conseguenze ambientali sempre più gravi. Le emissioni di CO₂ rappresentano la principale causa del cambiamento climatico, mentre NO_x e particolato contribuiscono in modo significativo all'inquinamento atmosferico e alla riduzione della qualità dell'aria. Nonostante tali problematiche siano note da tempo il settore dei trasporti è quello in cui le emissioni di gas serra sono cresciute più velocemente negli ultimi vent'anni, con un aumento del 25,9% rispetto ai livelli del 1990, a fronte di una riduzione complessiva delle emissioni negli altri settori. Si tratta di dati tutt'altro che confortanti, considerando che il trasporto rappresenta poco meno del 30% delle emissioni di gas serra totali dell'UE-27 (dati EEA, 2023).

Per far fronte a questo scenario, l'Unione Europea ha introdotto obiettivi climatici sempre più stringenti a partire dal 2021, con la *European Climate Law* che rende giuridicamente vincolante la neutralità climatica entro il 2050 e la riduzione del 55% delle emissioni entro il 2030 rispetto al 1990. Tali ambiziosi obiettivi rendono urgente lo sviluppo di combustibili alternativi, capaci di ridurre o azzerare le emissioni nette di carbonio pur consentendo la continuità di utilizzo dei motori a combustione interna. Tra i combustibili alternativi più promettenti, particolare attenzione è rivolta a idrogeno e ammoniaca entrambi privi di carbonio nella loro composizione chimica e quindi in grado di eliminare le emissioni dirette di CO₂ durante la combustione.

L'idrogeno è caratterizzato da un elevato potere calorifico (LHV) per unità di massa (120 MJ/kg), un ampio intervallo di infiammabilità (4.7–75% vol. in aria) e una velocità di fiamma notevolmente superiore a quella dei combustibili convenzionali, che garantisce tempi di accensione molto rapidi e stabilità di combustione. D'altra parte, presenta una densità energetica volumetrica estremamente bassa e richiede sistemi di stoccaggio in pressione (700 bar) o in forma liquida (sotto i -252.9 °C, a pressione atmosferica), con conseguenti problematiche legate a sicurezza e logistica, oltre che una modalità di produzione troppo dipendente dai combustibili fossili.

L'ammoniaca, al contrario, si distingue per la densità energetica volumetrica elevata (≈11.5 MJ/L) e per la possibilità di essere stoccata in forma liquida a pressioni moderate, sfruttando infrastrutture già esistenti analoghe a quelle del GPL. Inoltre, il suo numero di ottano

molto elevato la rende adatta all'impiego in motori ad accensione comandata. Tuttavia, le sue proprietà di combustione pongono sfide rilevanti: potere calorifico basso, velocità di fiamma molto bassa e alta temperatura di autoaccensione, che comportano lunghi ritardi all'accensione e scarsa stabilità ciclica, oltre ad un ristretto limite d'infiammabilità ed a un'elevata tendenza alla formazione di NO_x . L'ammoniaca è inoltre una sostanza tossica e corrosiva che richiede un'adeguata gestione in fase di stoccaggio.

Per queste ragioni diversi studi sperimentali, come quello di Lhullier et al. [1], hanno dimostrato come l'arricchimento dell'ammoniaca con idrogeno consenta di migliorare significativamente la stabilità ciclica e le prestazioni di combustione: l'idrogeno agisce da promotore di accensione, migliorando la reattività e riducendo i *misfire*, mentre l'ammoniaca fornisce la densità energetica e la facilità di stoccaggio necessarie a una reale applicabilità nei trasporti.

	Ammoniaca (NH_3)	Metanolo (CH_3OH)	Idrogeno (H_2)	Metano (CH_4)	Benzina
Stoccaggio	Liquido	Liquido	Compresso	Compresso	Liquido
Temperatura di stoccaggio (K)	300	300	300	300	300
Pressione di stoccaggio (MPa)	1.1	0.1	70	25	0.1
ρ @ stoccaggio (kg/m^3)	600	784.6	39.1	187	~740
LHV (MJ/kg)	18.8	19.9	120	50	44.5
LBV @ $\phi = 1$ (m/s)	0.07	0.36	3.51	0.38	0.58
Temperatura di autoaccensione (K)	930	712	773–850	859	503
Numero di Ottano	130	119	>100	120	90–98
FL in aria (vol.%)	15–28	6.7–36	4.7–75	5–15	0.6–8

Tabella 1, proprietà chimico-fisiche di ammoniaca, idrogeno e confronto con altri combustibili (condizioni standard: 300 K e 0.1 MPa)

In questo contesto, il presente lavoro di tesi si concentra sull'analisi numerica del comportamento di un motore originariamente progettato per funzionare a benzina ma qui alimentato con varie miscele di ammoniaca e idrogeno. L'obiettivo è valutare le potenzialità e le criticità legate all'utilizzo di questi combustibili in un motore ad accensione comandata, approfondendo in particolare gli aspetti connessi alla formazione e propagazione della fiamma, alla stabilità ed evoluzione della combustione.

1 Allestimento sperimentale

1.1 Descrizione del banco prova

Il motore da cui si sono stati ottenuti i dati sperimentali è un moderno SI a quattro cilindri e quattro tempi, modificato per funzionare come monocilindrico alimentando solo uno dei quattro cilindri, le cui specifiche sono riportate nella seguente tabella:

Modello PSA EP6DT	
Cilindrata unitaria	399.5 mm
Corsa	85.8 mm
Alesaggio	77 mm
Lunghezza biella	138.5 mm
Rapporto di compressione geometrico	10.5:1
Numero di valvole	4

Tabella 2, specifiche del motore

Sebbene il motore fosse originariamente progettato per funzionare con iniezione diretta di benzina, in questo caso i reagenti vengono premiscelati e successivamente iniettati in fase gassosa. Ciò consente al motore di mantenere i vantaggi geometrici tipici della configurazione GDI rispetto ai più semplici motori CFR. In particolare, la presenza di un pistone con cavità accentuata e di una camera di combustione a tetto *pent-roof* favorisce una maggiore turbolenza e un miscelamento più efficace della carica.

Come si nota osservando il setup sperimentale in *Figura 1*, il motore è azionato da un motore elettrico alla velocità costante di 1500 rpm, al fine di garantire la ripetibilità delle misure. Sull'albero motore è montato un encoder ottico Kübler per il monitoraggio della posizione angolare, la pressione in camera di combustione viene rilevata tramite un trasduttore piezoelettrico raffreddato ad acqua, mentre le temperature e le pressioni nei condotti di aspirazione e scarico sono controllate mediante termocoppie e trasduttori di pressione. La pressione interna al cilindro viene calibrata rispetto a quella media di aspirazione poco dopo l'apertura della valvola di ingresso, l'accensione avviene, invece, tramite la candela originale del motore. I flussi di ammoniacca, idrogeno e aria sono controllati usando dei flussimetri di

massa Brooks per poi venir preriscaldati alla temperatura di aspirazione di 323 K e premiscelati in un plenum di aspirazione prima dell'iniezione.

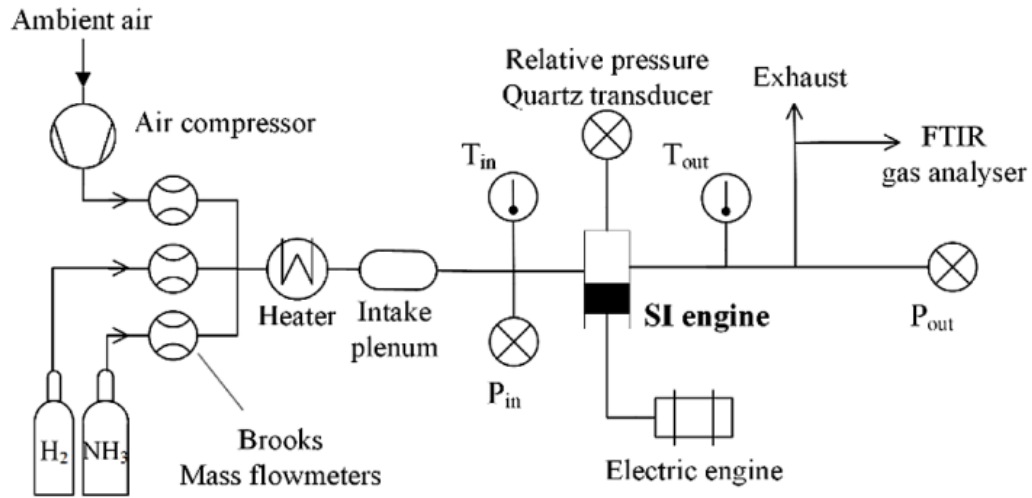
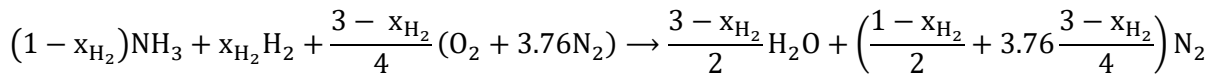


Figura 1, setup sperimentale

Infine, i gas di scarico umidi sono analizzati utilizzando uno spettrometro a trasformata di Fourier (FTIR) Gasmet per valutare le concentrazioni di H_2O , NO_x e NH_3 . Infine, un analizzatore di gas ADEV viene utilizzato su un campione secco dei gas di scarico per la misura di H_2 e O_2 . [1]

1.2 Condizioni operative

La reazione globale stechiometrica della combustione di NH_3/H_2 /aria è la seguente:



dove x_{H_2} è la frazione molare di idrogeno nella miscela.

Le reazioni di miscele non stechiometriche sono ottenute tenendo conto del rapporto di equivalenza definito come:

$$\phi = \frac{\frac{X_{H_2} + X_{NH_3}}{X_{air}}}{\left(\frac{X_{H_2} + X_{NH_3}}{X_{air}}\right)_{st}} \quad (1)$$

dove X_s rappresenta la frazione molare della specie s.

Dal punto di vista delle emissioni, la combustione di miscele NH_3/H_2 non produce CO_2 ma genera comunque dei composti azotati, tramite i meccanismi termici di Zeldovich, favoriti dalle alte temperature di fiamma e dalla presenza di specie contenenti azoto. In condizioni di miscela povera, la temperatura di combustione più bassa limita la produzione di NO_x , ma può aumentare lo slip di NH_3 per incomplete reazioni di ossidazione. Viceversa, in miscela ricca, l'elevata reattività e temperatura incrementano la formazione di NO_x e N_2O . L'aggiunta di idrogeno tende a migliorare la completezza della combustione riducendo l'ammoniaca residua, ma può amplificare la produzione di ossidi di azoto.

Per la combustione di ammoniaca pura il rapporto stechiometrico in massa risulta pari a circa 6, un valore quasi dimezzato rispetto a quello della benzina (~ 14.7). La temperatura in aspirazione è mantenuta costante per tutti i punti operativi al fine di dare coerenza allo studio e permettere un confronto tra i vari risultati, mentre la pressione di aspirazione varia a seconda del carico del motore così come l'anticipo d'accensione viene fatto coincidere, per ogni punto, al *MBT timing* (*Minimum advance for Best Torque*) ossia l'anticipo che massimizza la coppia utile. Essendo quest'ultima difficile da calcolare in laboratorio si usa come equivalente della massima coppia il massimo valore della pressione media effettiva indicata netta (IMEP_n).

La variabilità ciclo per ciclo è stata valutata registrando 100 cicli consecutivi di pressione per ogni condizione di prova e calcolando il valore medio, si considera raggiunta una stabilità soddisfacente quando il coefficiente di variazione della IMEP_n, COV(IMEP_n), su 100 cicli risulta inferiore al 5% [1].

Le condizioni operative su cui si è operato sono riassunte nella seguente tabella:

Velocità motore [rpm]	1500
Temperatura in aspirazione [K]	323
Pressione in aspirazione [bar]	[0.6 - 1.2]
Frazione molare di H_2 nel combustibile	[0 - 0.6]
Frazione massica di H_2 nel combustibile	[0 - 0.15]
Rapporto di equivalenza	[0.6 - 1.2]
Spark Timing (<i>SI timing</i>)	MBT

Tabella 3, condizioni operative

2 Modellazione della combustione premiscelata

2.1 Processi fondamentali della combustione

La combustione della miscela aria-combustibile all'interno del cilindro è uno dei processi chiave che controllano potenza, efficienza ed emissioni di un motore. Avere un *background* sui fenomeni di combustione rilevanti è quindi un prerequisito necessario per comprendere a pieno il funzionamento del motore.

La combustione rappresenta un processo chimico di ossidazione in cui il combustibile reagisce con un comburente, generalmente l'ossigeno presente nell'aria, liberando energia sotto forma di calore e producendo gas ad alta temperatura. Nei motori a combustione interna essa costituisce la fase attiva del ciclo, in quanto l'energia chimica immagazzinata nel carburante viene trasformata in energia meccanica grazie all'aumento di pressione che agisce sulla superficie del pistone, generando lavoro utile. La combustione premiscelata richiede che combustibile e ossidante siano già miscelati prima dell'innescio. Ciò è possibile solo a basse temperature, dove le reazioni radicaliche risultano inattive rispetto a quelle di terminazione (*three-body chain-breaking*). In queste condizioni la combustione è detta congelata e rimane metastabile. Successivamente alla fase di premiscelamento e compressione una scarica elettrica avvia il processo di combustione: dalla scintilla si sviluppa un “*kernel*” che dà origine alla fiamma, la quale si propaga attraverso il cilindro fino a raggiungere le pareti della camera di combustione. Una volta accesa, la fiamma si propaga nella camera di combustione attraverso un sottile fronte che separa la miscela fresca dai gas combusti.

L'avanzamento del fronte di fiamma è reso possibile dal trasferimento di calore: i prodotti della combustione, a temperatura elevata, cedono energia termica alla miscela non ancora ossidata, creando così le condizioni necessarie per l'autosostentamento del processo. Questo meccanismo è il risultato del forte accoppiamento tra la reazione chimica, i processi di trasporto (diffusione di massa e conduzione del calore) e il moto fluido.

2.2 Struttura e parametri caratteristici del fronte di fiamma

Nel *Capitolo 1* si è descritto il motore dal quale si sono ricavati i dati sperimentali. Si tratta di un motore SI, alimentato da una miscela ammoniacale/idrogeno/aria che prima di essere iniettata in fase gassosa è stata premiscelata e preriscaldata in un plenum. Ciò significa che al momento dell'accensione nel cilindro la miscela combustibile-ossidante sarà già omogenea e la fiamma si propagherà in condizioni di combustione premiscelata turbolenta, situazione in cui miscelamento e trasporto sono fortemente amplificati dal moto relativo di grandi vortici ed *eddies*, che caratterizzano i flussi ad alto Reynolds.

Per comprendere questo regime, è utile richiamare la struttura di base di una fiamma laminare. Come mostrato in *Figura 2.a* la miscela fresca fluisce da sinistra verso destra e attraversa tre zone distinte: la zona di preriscaldamento, dove la temperatura aumenta senza che avvengano reazioni significative; la zona di reazione, in cui si sviluppa la combustione con rilascio di energia; e infine la zona dei gas combusti, dove i prodotti raggiungono una condizione quasi stazionaria.

La situazione cambia in presenza di turbolenza. La *Figura 2.b* mostra come vortici di varie dimensioni nel flusso deformino il fronte di fiamma che non risulta più una superficie liscia, ma corrugata e deformata. Ciò permette di aumentare la superficie del fronte di fiamma e con essa i punti di interazione tra fiamma e miscela fresca, velocizzando la combustione.

Nonostante ciò, localmente, in ogni piccolo tratto del fronte, si ritrova la stessa struttura della fiamma laminare sopra descritta: il fronte mantiene, cioè, la sua microstruttura laminare, mentre nel complesso appare contorto e deformato dalla turbolenza. In altre parole, una fiamma turbolenta può essere interpretata come un insieme di “piccoli fronti laminari” (detti *flamelet*), che mantengono le caratteristiche chimico-fisiche della fiamma laminare, ma che, grazie alla turbolenza, si moltiplicano e si piegano nello spazio, accelerando notevolmente il processo di combustione. [2]

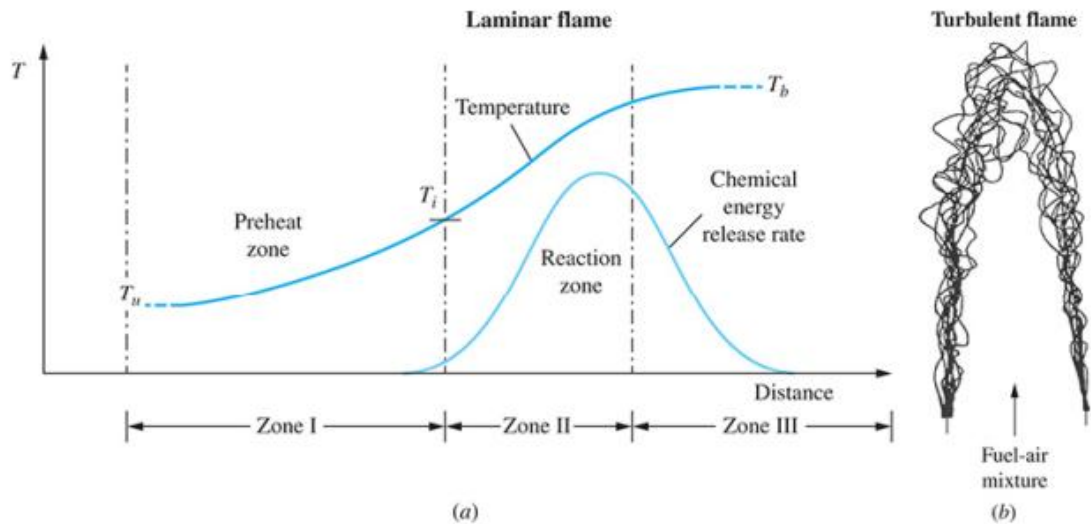


Figura 2, struttura di una fiamma premiscelata: (a) profili in una fiamma laminare premiscelata, (b) rappresentazioni successive del fronte di una fiamma premiscelata turbolenta

Per descrivere in modo quantitativo la propagazione della fiamma e distinguere i diversi regimi di combustione turbolenta è necessario introdurre alcuni parametri caratteristici. La Figura 3 mostra uno schema di una fiamma turbolenta in un motore SI e ne illustra la struttura.

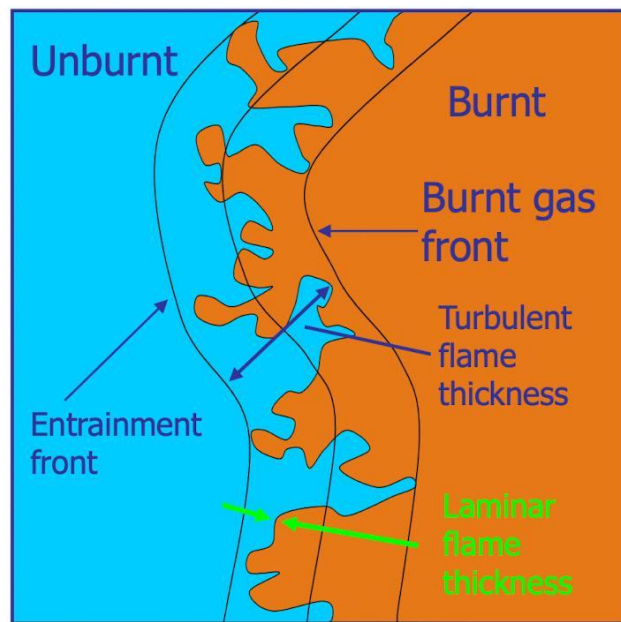


Figura 3, struttura della fiamma turbolenta in un motore ad accensione comandata

La fiamma turbolenta avanza nella miscela incombusta che si trova davanti, trascinata principalmente dal moto casuale dei gas all'interno della camera di combustione, ad una velocità di propagazione di fiamma turbolenta S_T con uno spessore definito come *turbulent flame thickness* individuato come la distanza tra il fronte anteriore (verso la miscela

incombusta) e quello posteriore (verso i gas bruciati) della fiamma increspata. Localmente, invece, ogni porzione del fronte di fiamma si muove ortogonalmente nella miscela di gas incombusti ad una velocità di propagazione di fiamma laminare S_L (definita come la velocità con cui la fiamma si propaga in una miscela incombusta quieta davanti ad essa) con uno spessore di fiamma laminare δ_L , definito come:

$$\delta_L = \frac{\alpha}{S_L} \approx \frac{D_L}{S_L} \approx \frac{\lambda}{\rho C_p S_L} \quad (2)$$

Essendo α la diffusività termica e D_L la diffusività molecolare (il loro rapporto rappresenta il numero di Lewis che, come spiegato nel *Paragrafo 3.3*, nei casi qui analizzati è vicino all'unità). Si nota come δ_L sia una proprietà chimico-fisica della miscela poiché dipende solo da proprietà del gas e dalle condizioni date.

Le fiamme turbolente, invece, si caratterizzano con l'intensità di turbolenza u' , intesa come valore quadratico medio delle fluttuazioni di velocità:

$$u' = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \left(\int_{t_0}^{t_0+\tau} u^2 dt \right)^{1/2} \quad (3)$$

con le varie scale di lunghezza del moto turbolento:

- la scala integrale l_I , caratterizza i vortici più grandi della turbolenza, cioè quelli che contengono la maggior parte dell'energia cinetica turbolenta, aventi tempo caratteristico pari a:

$$\tau_T = \frac{l_I}{u'} \quad (4)$$

- la scala di Kolmogorov l_K , caratterizza i vortici più piccoli, cioè le strutture in cui l'energia cinetica residua del flusso viene dissipata dalla viscosità molecolare in calore, con tempo caratteristico e scala di lunghezza:

$$\tau_K = \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (5)$$

$$l_K = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad (6)$$

dove ν è la viscosità cinematica ed ε il tasso di dissipazione di energia turbolenta (concetti approfonditi nel *Paragrafo 4.1.1*).

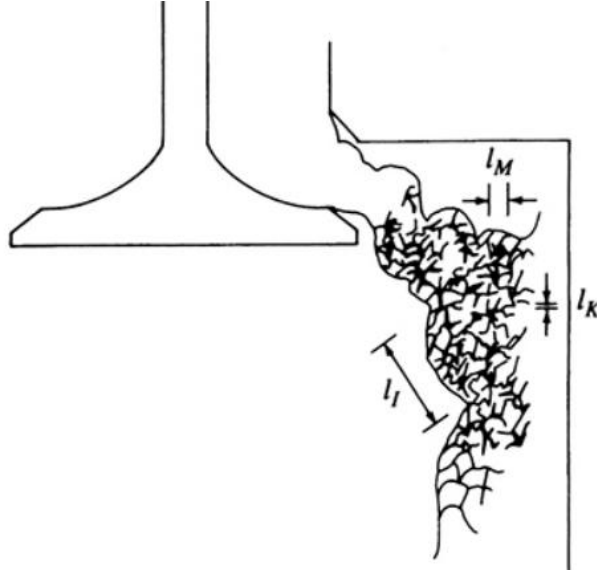


Figura 4, schema di un getto creato dal flusso attraverso la valvola di aspirazione e relativa struttura turbolenta derivante

Un parametro adimensionale che correla le due scale è il numero di Reynolds turbolento:

$$Re_T = \frac{u' l_I}{\nu} \quad (7)$$

per flussi turbolenti omogenei e isotropi rende valida la relazione:

$$Re_T^{-3/4} = l_K/l_I \quad (8)$$

Nella valutazione dei regimi di combustione turbolenta risulta fondamentale introdurre il numero di Damkholer:

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_L} = \frac{\left(\frac{l_I}{u'}\right)}{\left(\frac{\delta_L}{S_L}\right)} \quad (9)$$

Esso rappresenta proprio il rapporto tra un tempo fisico caratteristico del campo di moto turbolento (*eddy turnover time*) e il tempo caratteristico della reazione chimica (tempo di residenza in una fiamma laminare). Perciò un $Da \gg 1$ suggerisce che le reazioni chimiche sono molto più veloci del processo di mescolamento turbolento portando ad avere una fiamma solo lievemente distorta dal campo di turbolenza e ancora perfettamente laminare nella sua struttura interna, avendo un $l_I \gg \delta_L$, i vortici non riescono a penetrare all'interno della struttura interna del fronte di fiamma che non verrà quindi inspessita bensì increspata: si tratta del regime flamelet.

Altro parametro di fondamentale importanza per lo studio della combustione è il numero di Karlovitz:

$$Ka = \frac{1}{Da} = \frac{\tau_L}{\tau_K} = \left(\frac{L_T}{\delta_L}\right)^{-0,5} \left(\frac{u'}{S_L}\right)^{1,5} = \left(\frac{\delta_L}{l_K}\right)^2 \quad (10)$$

Quest'ultimo rappresenta il rapporto tra il tempo caratteristico della chimica (τ_L) e il tempo caratteristico del *micromixing* (riferiti quindi alla scala di Kolmogorov), risultando così proporzionale al rapporto tra spessore di fiamma laminare e dimensione caratteristica dei vortici di microscala. $Ka=1$ costituisce il criterio di Klimov-Williams che delimita il regime di combustione flamelet. Infatti, per $Ka > 1$, si avranno dei microvortici aventi dimensione paragonabile a quella del fronte di fiamma, che inizieranno ad interagire con la struttura laminare interna distruggendola. [3]

La relazione che lega i tre numeri adimensionali è:

$$Re_T = Da^2 Ka^2 \quad (11)$$

2.3 Regimi di combustione turbolenta: il diagramma di Borghi–Peters

Diversi autori negli anni (Bray, Williams, Borghi) hanno proposto diagrammi di fase per illustrare i differenti regimi nella combustione turbolenta premiscelata, come funzione di grandezze adimensionali. Tra i più noti ed usati anche in questa tesi per l'interpretazione dei vari punti operativi che si sono analizzati vi è il diagramma di Borghi-Peters, dal nome di chi lo ha inizialmente postulato (Borghi [5]) e poi successivamente esteso (Peters [4]). Questo diagramma bilogaritmico permette di identificare i vari regimi della combustione turbolenta e caratterizzare il tipo di fiamma, rappresentando in ascissa il rapporto tra la scala dei vortici turbolenti e lo spessore del fronte di fiamma $\left(\frac{l_t}{\delta_L}\right)$ mentre in ordinata il rapporto tra la fluttuazione di velocità turbolenta u' e la velocità di fiamma laminare S_L .

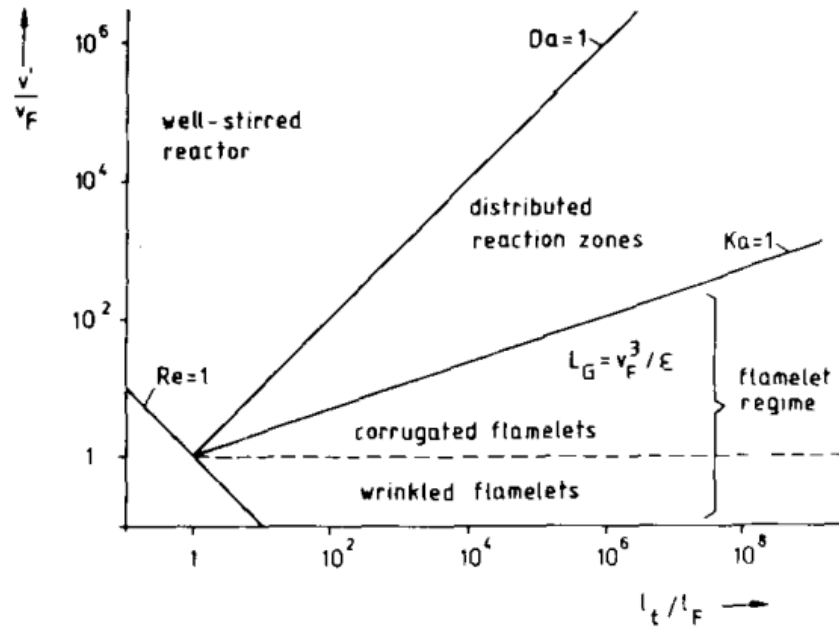


Figura 5, diagramma di Borghi-Peters che rappresenta i diversi regimi di una combustione premiscelata turbolenta, tratto dal lavoro di N.Peters del 1986

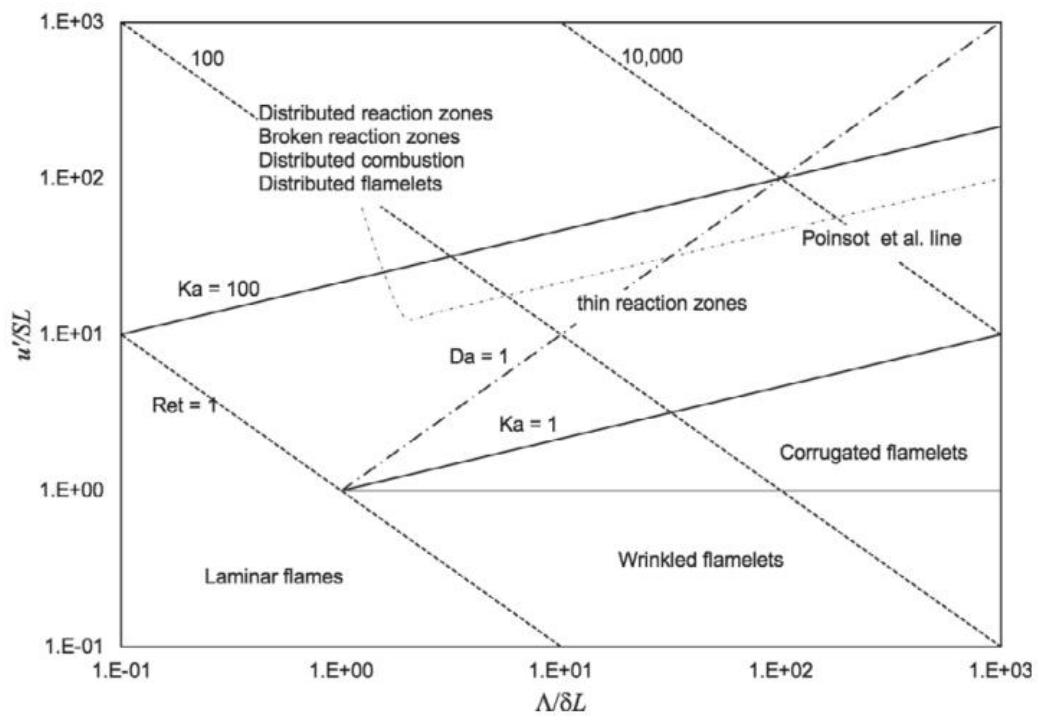


Figura 6, diagramma di Borghi-Peters aggiornato da N.Peters nel 1999

La rappresentazione delle linee $Re_T = 1$, $Da = 1$, $Ka = 1$, $Ka = 100$ e $\left(\frac{u'}{S_L}\right) = 1$ (Figura 6) permette l'individuazione di cinque regioni differenti:

1. per $Re_T < 1$: campo delle *laminar flamelets*;
2. per $Ka < 1$ e $\left(\frac{u'}{S_L}\right) < 1$: *wrinkled flamelets*; regione dove la turbolenza è troppo debole per deformare significativamente il fronte di fiamma che risulterà solo increspato;
3. per $Ka < 1$ e $\left(\frac{u'}{S_L}\right) > 1$: *corrugated flamelets*, si verificano delle interazioni tra gli *eddies* turbolenti ed il fronte di fiamma, con i primi capaci di spostare i *flamelet* senza però penetrare nella loro struttura interna, l'interazione tra i due è solo di natura puramente cinematica.

Queste due ultime regioni compongono il *regime flamelet*, ossia una condizione in cui i tempi caratteristici della turbolenza sono più lenti del tempo di attraversamento della fiamma laminare. Questo permette alla fiamma turbolenta di essere modellata localmente come laminare, aspetto cruciale su cui si fonda la modellazione numerica della combustione.

4. per Ka compreso tra 1 e 100: si parla di *distributed reaction zone*. In questo regime i tempi chimici sono più lunghi rispetto ai tempi caratteristici di turnover dei vortici più grandi, che quindi non riescono a penetrare all'interno del fronte di fiamma. Al contrario, gli *eddies* alla scala di Kolmogorov interagiscono con la struttura interna della fiamma laminare producendo forti tassi di stiramento;
5. per $Ka > 100$: siamo nella *broken reaction zone* o *well-stirred reactor*, dove i vortici turbolenti riescono a compiere molte rotazioni durante il tempo di attraversamento della fiamma, la struttura interna di quest'ultima viene di conseguenza spezzata portando ad un marcato ispessimento della fiamma.

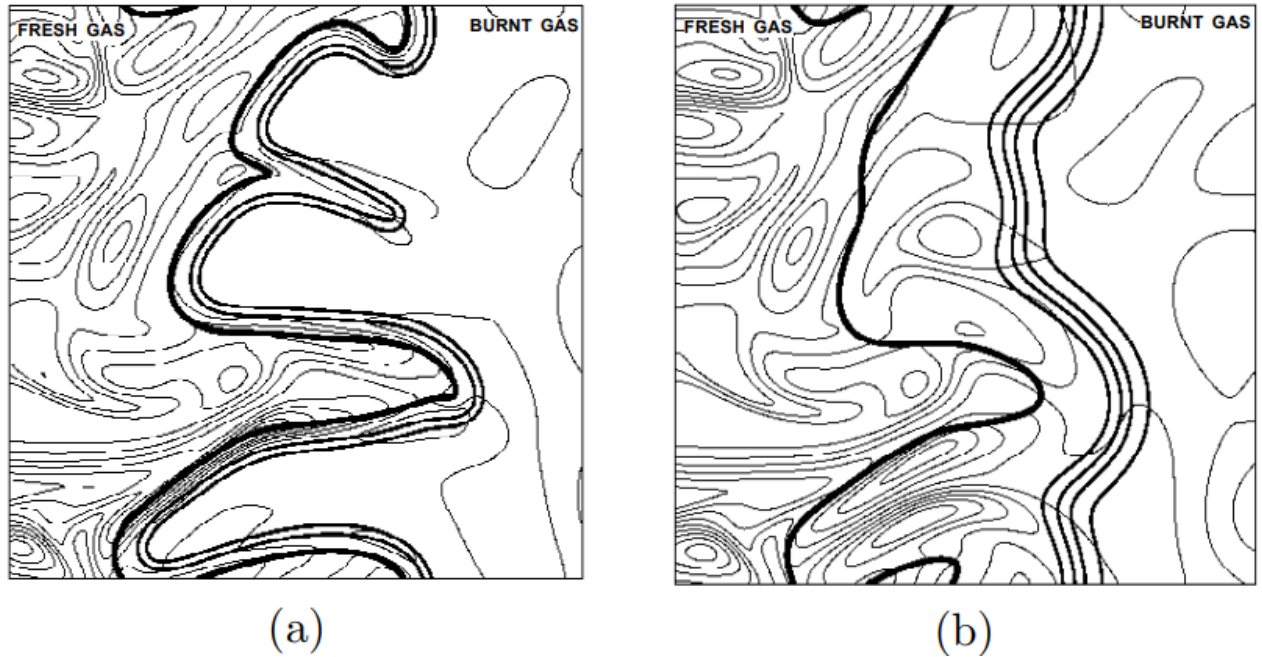


Figura 7, DNS di un regime (a) *wrinkled flamelet*, (b) *thickened-wrinkled flame*

Dalla Figura 7 è possibile osservare la differenza tra una fiamma nel regime *flamelet* (a) e una fiamma con numero di Karlovitz molto maggiore di 1 (b). Le linee spesse indicano il fronte di fiamma, ossia il confine tra i gas freschi e i gas combusti e si può notare come, nel caso (b), lo spessore della fiamma risulti circa cinque volte superiore rispetto al caso (a).

Le linee sottili, invece, rappresentano i campi di vorticità generati dalla turbolenza. Nel caso (a), la turbolenza deforma e increspa il fronte di fiamma, che però mantiene una struttura assimilabile a quella laminare. Al contrario, nel caso (b), le piccole scale turbolente penetrano nella zona di preriscaldamento, modificandone la struttura e causando il suddetto ispessimento. È importante notare che entrambe le simulazioni partono dallo stesso campo turbolento iniziale, a conferma che la differenza osservata è dovuta unicamente allo spessore di fiamma.

3 Modellazione numerica della combustione

La *Computational Fluid Dynamics* (CFD) è la disciplina che si occupa dell'analisi dei sistemi caratterizzati da flussi di fluidi, trasferimento di calore e fenomeni associati (come reazioni chimiche o combustione) attraverso simulazioni al computer. Essa rappresenta oggi uno degli strumenti più potenti e versatili a disposizione dell'ingegneria moderna, capace di supportare la ricerca, la progettazione e l'ottimizzazione in una vasta gamma di campi industriali e scientifici.

La CFD si basa sulle equazioni fondamentali di conservazione: conservazione della massa, conservazione della quantità di moto e conservazione dell'energia che hanno la caratteristica di essere non lineari, accoppiate e non risolvibili in forma analitica se non per pochi casi semplici e molto idealizzati. Un codice CFD per risolvere queste equazioni completa tre fasi:

- Pre-processing: fase iniziale in cui si fornisce la geometria del dominio fisico di interesse (tramite un modello CAD), si procede alla sua discretizzazione in una mesh e alla specifica delle condizioni al contorno per le celle coincidenti con i limiti del dominio. È il momento più delicato e dispendioso del processo poiché dalla qualità del dominio e della mesh (spesso non uniforme ma più fitta nelle zone cui il campo fluidodinamico presenta forti variazioni) dipende la bontà della soluzione numerica;
- Processing: utilizzando un codice CFD, si risolvono le equazioni governanti di massa, quantità di moto ed energia in tutto il dominio discretizzato dopo aver fissato i criteri di convergenza;
- Post-processing: avviene l'estrazione e l'analisi dei risultati della sperimentazione e la creazione di output (grafici, visualizzazioni 3D, mappe di temperatura) utili per supportare le decisioni di progettazione.

L'analisi CFD risulta ormai uno strumento efficace a supporto delle prove sperimentali ma che al contrario di quest'ultime ha tempi e costi di sviluppo sensibilmente ridotti, permette di investigare un numero di posizioni virtualmente illimitate e di considerare un numero elevato di variazioni alle condizioni di funzionamento e alla geometria analizzata con sforzi limitati. Inoltre, il suo utilizzo permette di studiare le scale più piccole della turbolenza, i limiti sono rappresentati dalla potenza di calcolo e dalla disponibilità di codici ad elevata accuratezza numerica [8].

3.1 Approcci disponibili in CFD

Nel campo della CFD la combustione può essere trattata con diversi livelli di complessità, a seconda del dettaglio con cui viene rappresentata la chimica e delle risorse computazionali disponibili.

I modelli a cinetica dettagliata, come il SAGE implementato in CONVERGE, si basano sul meccanismo chimico completo, ossia sull'elenco di tutte le specie e delle reazioni elementari che governano l'ossidazione del combustibile. In ciascuna cella del dominio, a ogni passo temporale, viene risolta l'intera rete di reazioni, determinando la formazione dei prodotti, il rilascio di calore e la velocità di avanzamento del processo combustivo.

Una seconda categoria di modelli è quella con approccio *flamelet*, in cui la descrizione della combustione si concentra sul modo in cui la turbolenza contribuisce ad aumentare la superficie del fronte di fiamma, accelerando così la velocità di combustione. A questa categoria appartiene il modello ECFM, che è stato scelto per le simulazioni di questa tesi e verrà descritto nel dettaglio nella sezione successiva.

3.2 Modello ECFM

L'*Extended Coherent Flame Model* (ECFM) [9] è un modello di riferimento per la descrizione della combustione premiscelata in regime turbolento. Il suo scopo è fornire una rappresentazione efficace del fenomeno evitando di risolvere l'intera cinetica chimica dettagliata, che risulterebbe estremamente complessa e costosa dal punto di vista computazionale.

ECFM costituisce un'estensione del *Coherent Flame Model* proposto da Marble e Broadwell (1977) ed è impiegato principalmente nello studio della combustione premiscelata. In questo approccio, il fronte di fiamma viene rappresentato come una superficie tridimensionale di spessore nullo che si propaga nello spazio separando i gas freschi da quelli combusti. La dinamica del fronte non viene calcolata direttamente attraverso la risoluzione dei meccanismi cinetici chimici, ma viene descritta tramite correlazioni e tabelle precalcolate, le

quali consentono di prevedere la velocità e l'evoluzione del fronte in funzione delle condizioni locali di miscela e di turbolenza.

La velocità di propagazione del fronte di fiamma è ricavata tramite due contributi:

- 1) Chimico, rappresentato dalla velocità di fiamma laminare S_L , che dipende solo dalle proprietà chimico-fisiche del combustibile, oltre che dalle condizioni operative della combustione;
- 2) Turbolento, descritto dalla densità di superficie di fiamma Σ (*flame surface density*), la quale indica il grado di corrugamento indotto dai vortici turbolenti. Un aumento di Σ implica una maggiore superficie del fronte e quindi più punti di interazione con la miscela fresca, di conseguenza un'accelerazione del processo di combustione.

Il modello ECFM assume che ogni cella possa essere descritta come combinazione di due soli stati: gas freschi e gas bruciati. La transizione tra i due è controllata da $\tilde{c}$ ossia la variabile di progresso in massa che rappresenta la frazione in massa della miscela già trasformata in prodotti della combustione.

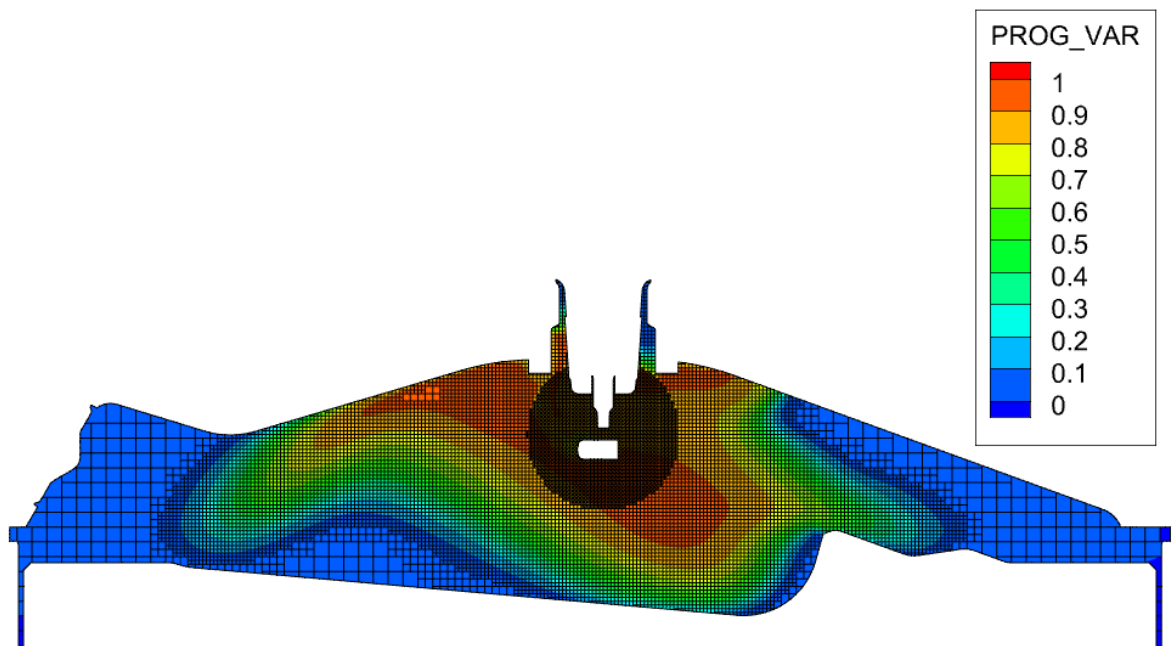


Figura 8, campo della variabile di progresso $\tilde{c}$ in una sezione 2D di un dominio

Essa assume valori compresi tra 0 e 1: valori prossimi a 0 indicano i gas freschi, valori prossimi a 1 i gas completamente bruciati, mentre valori intermedi ($0 < \tilde{c} < 1$) rappresentano le celle attraversate dal fronte di fiamma. In Figura 8 è riportato proprio un esempio di distribuzione della variabile di progresso $\tilde{c}$ (PROG_VAR) ottenuta dal post-processing di una

simulazione CFD. La scala di colori permette di distinguere i gas non reagiti (blu) dai prodotti di combustione (rosso), con la zona di transizione che rappresenta il fronte di fiamma.

La variabile si calcola come rapporto tra la somma delle frazioni massiche dei prodotti combusti ($\tilde{Y}_i^b$) e la massa totale, con la seguente formula:

$$\tilde{c} = \frac{\sum_i \tilde{Y}_i^b}{\sum_i \tilde{Y}_i^u + \sum_i \tilde{Y}_i^b} \quad (12)$$

Su questa base, il modello applica una decomposizione bimodale (*Figura 9*) ossia ogni cella è descritta come combinazione di due soli stati: gas freschi e gas bruciati.

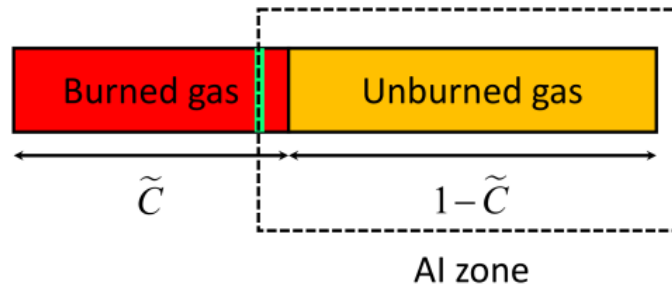


Figura 9, schema della decomposizione bimodale adottata nel modello ECFM

Per estendere la descrizione vengono introdotte altre variabili di progresso:

- $\bar{c}$ ossia la variabile di progresso volumetrica (che indica quanto volume della cella è occupato dai gas combusti):

$$\bar{c} = \frac{\rho}{\rho_b} c \quad (13)$$

- $\tilde{c}_{ai}$ ossia il contributo da autoaccensione, essendo Y_i la frazione massica della specie all'interno della cella calcolata usando la variabile di progresso (*Eq. 16*). Si ottiene come segue:

$$\tilde{c}_{ai} = \frac{\tilde{Y}_{N_2}^{b,ai}}{\tilde{Y}_{N_2}^{b,ai} + \tilde{Y}_{N_2}^{b,\Sigma}} \cdot \tilde{c} \quad (14)$$

dove $\tilde{Y}_{N_2}^{b,ai}$ e $\tilde{Y}_{N_2}^{b,\Sigma}$ rappresentano rispettivamente la frazione in massa di N_2 derivante dai gas bruciati per autoaccensione e per ossidazione tramite fronte di fiamma.

- $\tilde{c}_\Sigma$, ossia il contributo da propagazione del fronte, è collegato ad Σ (*flame surface density*) e determina la parte di combustione attribuibile alla propagazione del fronte di fiamma. Si ottiene sottraendo alla variabile di progresso massica il contributo derivante dall'autoaccensione:

$$\tilde{c}_\Sigma = \tilde{c} - \tilde{c}_{ai} \quad (15)$$

- $\tilde{Y}_i$ ossia la frazione massica media della i-esima specie in una cella, e si calcola come combinazione tra gas in autoaccensione e gas bruciati, mediati dalla variabile $\tilde{c}_\Sigma$, nella seguente maniera:

$$\tilde{Y}_i = (1 - \tilde{c}_\Sigma) \tilde{Y}_i^{ai} + \tilde{c}_\Sigma \tilde{Y}_i^b \quad (16)$$

Un parametro fondamentale che collega la propagazione laminare (chimica) con l'effetto della turbolenza è il *premixed flame propagation source term* $\tilde{\omega}_c^\Sigma$, ossia un termine sorgente che descrive la velocità con cui la miscela fresca viene consumata dal fronte in una cella. Esso dipende dalla densità dei gas freschi ρ_u , dalla densità locale ρ , dalla velocità di fiamma laminare S_L e da Σ (FSD) secondo la relazione:

$$\tilde{\omega}_c^\Sigma = \frac{\rho_u}{\rho} S_L \Sigma \quad (17)$$

3.2.1 Equazione di trasporto

L'equazione che governa la turbolenza e calcola come Σ evolva nel tempo è l'equazione di trasporto della *Flame Surface Density*:

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial (u_i \Sigma)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\Sigma}{\rho} \right) \right] + (At_{sgs} + At_{res} + Crurv_{sgs}) \Sigma - D + P_k \quad (18)$$

dove:

- μ è la viscosità molecolare,
- Sc è il numero di Schmidt,
- At_{sgs} , definito come *sub-grid scale tangential strain*, è la produzione della superficie di fiamma dovuta al *turbulent stretch* non risolto, cioè quello che avviene a scale inferiori alla griglia. È il più significativo di tutta l'Eq. (18) ed è ottenuto come:

$$At_{sgs} = \alpha \frac{3}{\sqrt{55}} Ka \frac{S_L^0}{\delta_L} \left[1 - \exp \left(-\frac{3}{2} C_k \frac{1}{Re_t} \left(\frac{\pi l_t}{\delta_c} \right)^{4/3} \right) \right]^{1/2} \quad (19)$$

L'equazione sopra espressa, proposta da Suillaud et al. [11], è stata sviluppata come estensione di diversi modelli precedenti e introduce una *efficiency function* $C(k_+)$

concepita per quantificare l'efficacia con cui ciascuna scala turbolenta, associata a un numero d'onda k , è in grado di stirare il fronte di fiamma.

Nei modelli originari, come ad esempio quello di Charlette et al., si assumeva che tutte le scale turbolente contribuissero con la stessa efficienza alla deformazione del fronte di fiamma. Questa ipotesi risulta, però, poco realistica poiché i vortici di dimensione ridotta non hanno la stessa capacità di influenzare la fiamma rispetto a quelli di dimensione maggiore. Per superare questo limite, Suillaud et al. hanno proposto di interpretare la fiamma come un filtro passa-basso (*LPF model*) nello spettro turbolento dei numeri d'onda.

In questo approccio, lo spessore della fiamma laminare δ_c viene assunto come scala di *cut-off*. Di conseguenza, la funzione di efficienza assume un andamento binario (viene ossia modellata come una funzione a gradino di Heaviside):

- $C(k_+) = 1$ se $k_+ < \frac{l_t}{\delta_c}$, per scale turbolente più grandi dello spessore della fiamma che quindi contribuiscono effettivamente allo stiramento del fronte;
- $C(k_+) = 0$ per le scale inferiori, che non sono in grado di incidere in maniera significativa sul processo.

Il parametro su cui ci si è maggiormente concentrati nel corso delle simulazioni è stato α_{stretch} , denominato nell'*Eq. (19)* come semplicemente α , ma qui ridefinito per evitare ambiguità con altri parametri (come, ad esempio, la diffusività termica) e per allinearsi alla nomenclatura usata nei file sul software *CONVERGE*. Esso è un coefficiente di calibrazione che modula l'intensità con cui la turbolenza contribuisce alla produzione di superficie di fiamma, agendo come fattore di scala empirico che compensa gli errori derivanti dal modello LPF. Questo parametro consente al modello di mantenere validità predittiva in un ampio intervallo di condizioni, si calibra confrontando le simulazioni con i dati ottenuti sperimentalmente e la sua relativa costanza al variare delle condizioni rappresenta un indicatore della robustezza e affidabilità predittiva del modello di combustione. Gli effetti di tale calibrazione verranno analizzati in dettaglio nel *Capitolo 6*. [12]

- At_{res} , definito come *resolved tangential strain*, è la produzione per dilatazione del flusso medio. Rappresenta l'effetto dei vortici di dimensioni maggiori, che sono ben descritti dalla mesh e non hanno bisogno di essere modellati ed è ottenuto come:

$$At_{res} = \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} \quad (20)$$

- $Crurv_{sgs}$ è l'effetto di dilatazione termica e curvatura della fiamma, ricavata tramite l'equazione:

$$Cruv_{sgs} = \frac{2 \rho_u}{3 \rho_b} S_L \frac{1 - \tilde{c}_\Sigma}{\tilde{c}_\Sigma} \Sigma \quad (21)$$

- P_k è il termine sorgente esterno (ad esempio scintilla);
- D è il termine di distruzione della superficie di fiamma per consumo chimico della miscela. Si contrappone ai termini di produzione (At_{sgs} , At_{res} , $Cruv_{sgs}$, P_k) ed è proporzionale ad un coefficiente β utilizzato come parametro di calibrazione. Nel presente lavoro di tesi tale parametro è stato mantenuto unitario in tutte le simulazioni svolte.

3.3 Effetti di flame stretch e proprietà diffusivo-termiche

Come discusso nella precedente sezione, nel modello ECFM il parametro empirico $\alpha_{stretch}$ compare nell'equazione di trasporto della *Flame Surface Density* (Eq. (18)), ed ha il ruolo di calibrare la sensibilità del fronte di fiamma all'azione della turbolenza.

Un aspetto cruciale nella combustione premiscelata, però, è rivestito dallo stretch di fiamma (κ) cioè la variazione relativa della superficie del fronte di fiamma nel tempo:

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (22)$$

dove A è l'area istantanea della superficie di fiamma.

Lo stretch è la combinazione di due contributi:

- Strain rate: dovuto ai gradienti di velocità del campo fluido, tipicamente generati dalla turbolenza, che tendono a stirare ed incresparsi la fiamma;
- Curvatura: legata alla geometria locale del fronte di fiamma

L'effetto dello stretch sulla velocità di fiamma non è univoco, ma dipende dalle proprietà diffusivo-termiche della miscela, descritte tramite il numero di Lewis che mette in relazione la diffusività termica α_t (misura quanto velocemente il calore si diffonde nel gas per conduzione)

con la diffusività di massa D (indica quanto velocemente le molecole di combustibile si diffondono dentro la miscela):

$$Le = \frac{\alpha_t}{D} \quad (23)$$

L'idrogeno ha tipicamente valori di Le molto bassi, al di sotto del valore unitario, in quanto, com'è tipico dei combustibili con alto intervallo di infiammabilità, la diffusività in massa è molto più rapida di quella termica. L'esatto opposto si verifica con l'ammoniaca, che ha valori di Le superiori ad 1, sintomo di un combustibile con basse velocità di fiamma e grandi rischi di instabilità locali. [7]

Il numero di Lewis è strettamente connesso con la consumption speed (s_c) tramite un nuovo parametro adimensionale, il numero di Markstein normalizzato (M_a^c), attraverso le seguenti relazioni:

$$\frac{s_c}{s_L^0} = 1 - M_a^c \frac{\kappa \delta}{s_L^0} \quad (24)$$

$$M_a^c = \frac{1}{2} \beta (Le - 1) \frac{T_1}{T_2 - T_1} \int_0^{\frac{T_2 - T_1}{T_1}} \frac{\ln(1+x)}{x} dx \quad (25)$$

Quindi si nota come il numero di Markstein sia direttamente proporzionale ad $(Le - 1)$. Nello specifico:

- se $Le > 1$ (come nel caso dell' NH_3) si avrà $M_a^c > 0$, perciò per $\kappa > 0$ si otterrà una diminuzione di s_c ;

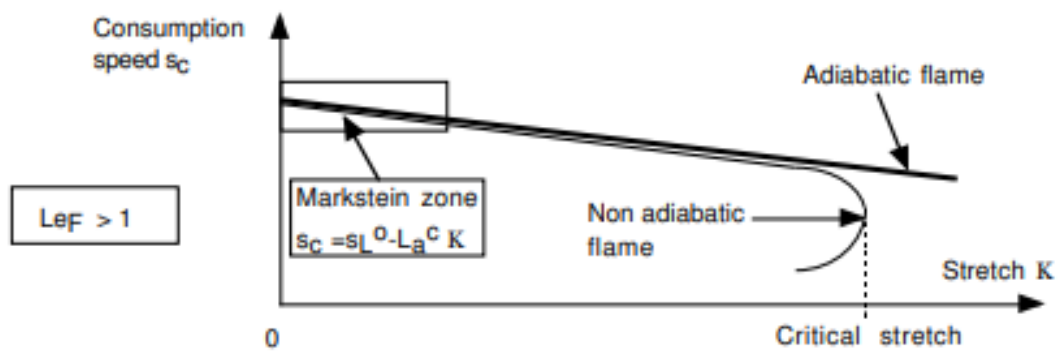


Figura 10, effetti dello stretch su un fronte di fiamma laminare con $Le > 1$

- se $Le < 1$ (come nel caso dell' H_2) si otterrà $M_a^c < 0$ (pendenza positiva nella zona lineare, detta 'Markstein zone', Figura 11), perciò per $\kappa > 0$ si avrà un aumento di s_c .

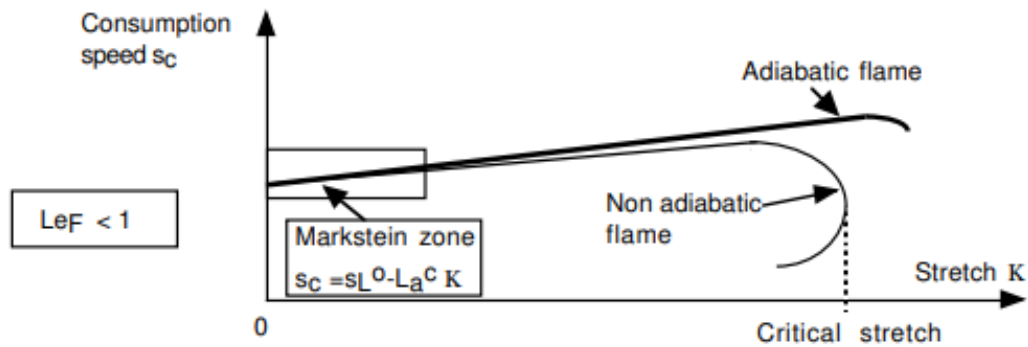


Figura 11, effetti dello stretch su un fronte di fiamma laminare con $Le < 1$

Si può, allora, concludere che l'effetto del *flame stretch* non è univoco, ma dipende dalle proprietà diffusivo-termiche della miscela. Infatti, per miscele con $Le < 1$ (come il caso delle miscele ricche di idrogeno) si avranno dei casi di instabilità termo-diffusive ossia dove la maggiore diffusione di massa (D) rispetto alla termica favorisce l'apporto di specie fresche alla zona di reazione più di quanto il calore venga dissipato e ciò porta all'aumento della velocità di fiamma prima descritto matematicamente. Infatti, una fiamma idrogeno-aria magra può arrivare a raddoppiare la sua velocità se stirata.

Mentre, per miscele con $Le > 1$ (come quelle a base di ammoniac) accadrà che il calore si disperde più velocemente di quanto il combustibile fresco riesca a raggiungere il fronte di fiamma. Se il fronte viene stirato, questo disequilibrio viene ancora più accentuato e porta alla formazione di zone che ricevono più calore che combustibile, con la conseguente possibile formazione di estinzioni locali. [7]

Nel complesso, la corretta caratterizzazione del flame stretch e dei numeri di Lewis e Markstein che lo descrivono costituisce uno strumento fondamentale per la predizione accurata della velocità di combustione e della stabilità del fronte. Tuttavia, nel caso specifico di questo lavoro, l'effetto resta relativo poiché non si presentano mai condizioni di $Le < 1$: a differenza dei motori ad idrogeno, specie in miscele magre, le miscele a base di ammoniac non portano a instabilità termo-diffusive. Per questo motivo, tale fenomeno non è stato incluso nel modello, e la sua omissione non introduce un errore significativo nelle simulazioni condotte.

4 Modellazione numerica della turbolenza

La turbolenza rappresenta uno degli aspetti più complessi della meccanica dei fluidi. Nel capitolo precedente è stato mostrato come essa sia intrinsecamente legata al processo di combustione, risultando uno dei parametri che la influenza maggiormente. Si è in particolare accennato, utilizzando le specifiche formule, al meccanismo di cascata energetica che porta l'energia cinetica posseduta dai vortici di maggiori dimensioni (legati alla scala integrale) ad essere trasferita verso strutture sempre più piccole, fino al raggiungimento della scala di Kolmogorov, alla quale gli *eddies* dissipano l'energia tramite calore per effetto della viscosità.

La descrizione completa della turbolenza e la sua corretta modellazione risultano perciò di fondamentale importanza per la buona riuscita delle simulazioni numeriche, e nei processi di combustione turbolenta può essere affrontata a tre livelli di complessità:

- DNS (*Direct Numerical Simulations*): le equazioni istantanee di Navier–Stokes vengono risolte complete, senza introdurre alcun modello per i moti turbolenti: tutte le scale della turbolenza sono determinate esplicitamente e i loro effetti sulla combustione vengono catturati in maniera diretta. La DNS è quindi in grado di prevedere, ad esempio, tutte le variazioni temporali della temperatura, esattamente come farebbe un sensore ad alta risoluzione in un esperimento;
- LES (*Large Eddy Simulation*): con questo approccio le grandi scale turbolente vengono calcolate esplicitamente, mentre gli effetti delle scale più piccole vengono modellati tramite regole di chiusura di sottogriglia (*subgrid closure rules*). Quest'ultime, infatti, tendono a presentare caratteristiche simili anche in applicazioni diverse. Ciò permette di utilizzare modelli di turbolenza relativamente semplici e più universali, applicabili a differenti configurazioni;
- RANS (*Reynolds Averaged Navier–Stokes*): in questo approccio non si risolvono le fluttuazioni istantanee, ma si calcolano direttamente i campi medi di velocità, pressione, temperatura e frazioni di specie chimiche.

In *Figura 12* emergono bene le differenze tra i tre diversi approcci di modellazione CFD sopra descritti, in una applicazione ad un getto turbolento. Nel caso RANS il campo di flusso appare regolare, poiché non vengono risolte le fluttuazioni. Con l'approccio LES emergono le grandi strutture turbolente, che vengono calcolate direttamente, mentre le piccole scale

rimangono modellate. Infine, la DNS risolve tutte le scale del moto turbolento, mostrando la massima fedeltà nella descrizione del campo, ma a costi computazionali molto più elevati.

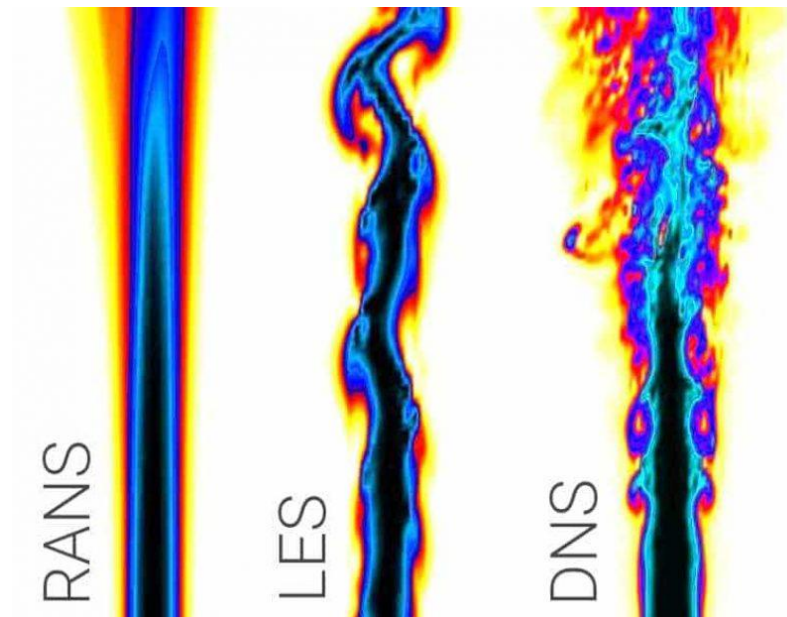


Figura 12, differenze dei tre diversi approcci di modellazione CFD applicati a un getto turbolento

L'approccio RANS costituisce la metodologia più utilizzata in ambito ingegneristico, poiché consente di ottenere risultati a costi computazionali relativamente bassi ed è applicabile a geometrie e condizioni operative complesse, e per tali motivi è stato l'approccio usato durante le simulazioni numeriche verranno trattate in questa tesi.

4.1 Approccio RANS (Reynolds Averaged Navier–Stokes)

Storicamente, l'approccio RANS (*Reynolds Averaged Navier–Stokes*) è stato il primo ad essere sviluppato per la simulazione dei flussi turbolenti, poiché la risoluzione diretta del campo istantaneo all'interno di una fiamma turbolenta risultava impraticabile. In un flusso turbolento, infatti, le grandezze di interesse, come velocità, temperatura o frazioni di specie chimiche, presentano continue oscillazioni nel tempo. L'idea alla base dei RANS è quindi quella di separare ciascuna variabile nella sua componente media, che rappresenta l'andamento regolare e ripetibile del flusso, e in una parte fluttuante, che descrive le deviazioni turbolente attorno alla media. Inserendo questa decomposizione nelle equazioni di Navier-Stokes e mediandole per comprendere il comportamento medio del flusso.

Per i flussi a densità variabile, tipici della combustione, si utilizza in particolare la decomposizione di Favre (*mass-weighted decomposition*), nella quale la media è pesata con la densità, in modo da trattare correttamente le correlazioni tra densità e grandezze fluttuanti. La variabile mediata viene quindi definita come:

$$\bar{f} = \frac{1}{t} \int_0^t f(t') dt' \quad (26)$$

essendo t l'intervallo di tempo. L'approccio di Favre definisce:

$$\tilde{f} = \frac{\bar{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (27)$$

$$f = \tilde{f} + f'' \text{ con la condizione } \widetilde{f''} = 0$$

Applicando questo formalismo matematico alle equazioni sopra citate e successivamente mediandole (qui, a titolo esemplificativo, si riporta solo l'applicazione all'equazione della quantità di moto per non appesantire la trattazione; per una descrizione più completa si rimanda al Capitolo 4 '*Introduction to Turbulent Combustion*' del volume '*Theoretical and Numerical Combustion*' [7]), si ottiene:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}) \quad (28)$$

Il termine $\widetilde{u_i'' u_j''}$, definito sforzo di Reynolds (*Reynolds stresses*), rappresenta il contributo della turbolenza al trasporto medio di quantità di moto. Sebbene la decomposizione e la successiva operazione di media eliminino l'effetto diretto delle singole fluttuazioni istantanee, nelle equazioni mediate rimangono le correlazioni tra fluttuazioni. Tali termini non vengono calcolati esplicitamente in un approccio RANS e non essendo noti a priori devono essere stimati mediante modelli di chiusura.

4.1.1 Modello RANS RNG $k - \varepsilon$

Il modello $k - \varepsilon$ è uno dei più diffusi modelli di chiusura per le equazioni RANS, nonché quello utilizzato nelle simulazioni presentate in questa tesi. Esso si basa sull'introduzione di due grandezze supplementari, che affiancano le variabili mediate tipiche di qualsiasi approccio RANS:

- k , ossia l'energia cinetica turbolenta, che indica la quantità di energia contenuta nei vortici turbolenti;
- ε , ossia il tasso di dissipazione turbolenta, che rappresenta la velocità con cui l'energia turbolenta viene trasferita verso le scale più piccole fino a dissiparsi in calore viscoso.

Per chiudere gli stress di Reynolds presenti nella RANS vengono introdotte due equazioni di trasporto aggiuntive, che includono le tre variabili sopra presentate: una equazione per k e una per ε . L'unione di queste due variabili ne crea una nuova, denominata viscosità turbolenta, che rappresenta l'effetto medio delle fluttuazioni turbolente sul trasporto di quantità di moto, calore e specie chimiche, che entra nelle RANS, sostituendo gli stress di Reynolds:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (29)$$

Questo modello, molto popolare per la sua robustezza ed economicità, tuttavia, si basa su ipotesi semplificative forti come presenza di numeri di Reynolds elevati, turbolenza omogenea e isotropa o la sottostima di fluttuazioni di velocità dovute a moti a bassa frequenza. Nonostante i limiti espressi, rimane comunque un modello che presenta un ottimo compromesso tra accuratezza e costi computazionali. [7] [9]

Le equazioni di chiusura relative a k ed ε richiedono dei coefficienti empirici, calibrati sperimentalmente, che assicurano che il modello riproduca bene i flussi di riferimento. Nelle simulazioni presentate, essi hanno assunto i seguenti valori:

C_μ	0.0845
$C_{\varepsilon 1}$	1.42
$C_{\varepsilon 2}$	1.68
$C_{\varepsilon 3}$	-1.0
β	0.012
η_0	4.38
Reciprocal TKE Prandtl	1.39
Reciprocal ε Prandtl	1.39

Tabella 4, Valori dei coefficienti di chiusura del modello RNG $k - \varepsilon$ utilizzato nelle simulazioni

5 Configurazione del modello di simulazione

Il motore oggetto di studio è un Peugeot EP6DT, ciclo 4 tempi, alimentato ad idrogeno e ammoniac, le cui caratteristiche geometriche principali sono state riportate nella *Tabella 2* del *Capitolo 1*. Rispetto ai dati nominali dichiarati, è stata riscontrata una differenza nel rapporto di compressione, infatti, dalle analisi di pressione in camera e AHRR, esso non risulta pari a 10,5, bensì a 9,5. Tale discrepanza è probabilmente riconducibile a errori in fase di montaggio del motore sul banco prova.

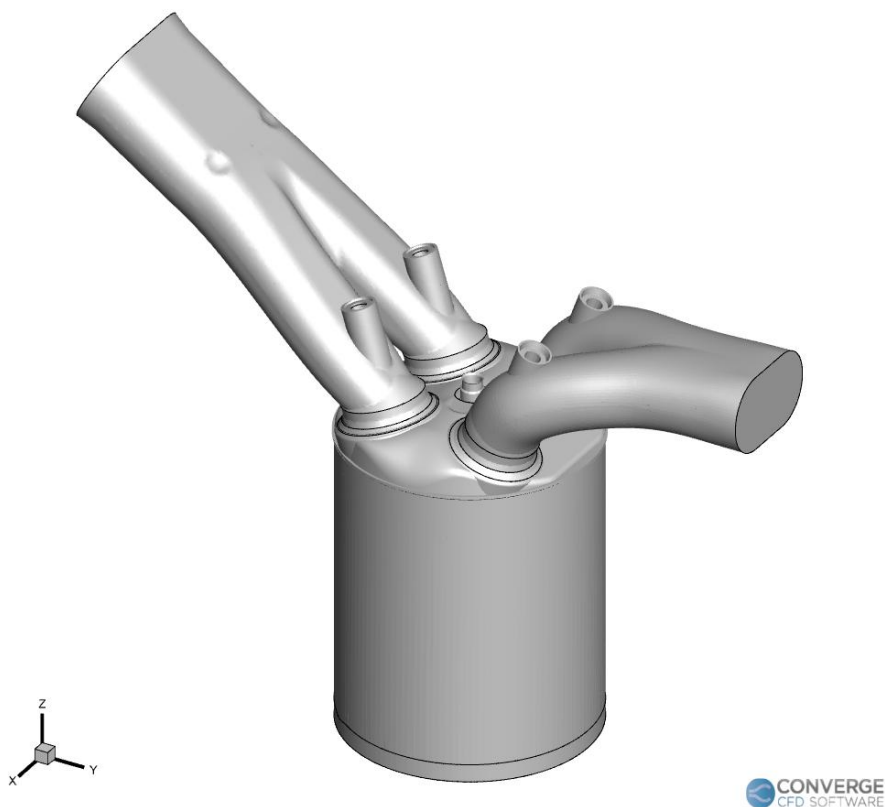


Figura 13, geometria 3D del motore utilizzato per le simulazioni CFD

Le simulazioni CFD sono state condotte utilizzando il software *CONVERGE v.4.1.2* mentre per il post-processing dei risultati si è impiegato *Matlab*, utilizzato per le analisi numeriche e la creazione di grafici, in funzione dell'angolo di manovella, relativi a: pressione in camera di combustione, AHRR (*Apparent Heat Release Rate*) e MFB (*Mass Fraction Bruned*). In tali grafici sono riportate due curve, corrispondenti a due cicli di combustione consecutivi, in modo da evidenziare l'eventuale influenza delle condizioni iniziali sul primo ciclo e di disporre di un secondo ciclo meno condizionato da tali effetti, quindi più rappresentativo del comportamento del sistema. *Matlab* è stato inoltre impiegato per la

costruzione del diagramma di Borghi-Peters, mentre *Tecplot 360* è stato utilizzato per la visualizzazione e l'analisi dei file di output 3D generati da CONVERGE.

Proprio su CONVERGE si è implementata la simulazione, usando come:

- modello di combustione: ECFM (Sezione 3.2);
- modello di turbolenza: RANS RNG $k - \varepsilon$ (Sezione 4.1.1);
- modello di accensione: ISSIM;
- modello di trasferimento termico a parete: GruMo-UniMORE

5.1 Condizioni al contorno e iniziali

Un passaggio preliminare fondamentale nella preparazione della simulazione CFD ha riguardato la definizione delle regioni fluide, permettendo la suddivisione del dominio in tre volumi principali: *intake*, *exhaust* e *cylinder*.

Successivamente, come evidenziato in *Figura 14*, ad ogni regione del modello CAD importato in CONVERGE è stata assegnata una *boundary* specifica, con le relative condizioni al contorno. In particolare, per le superfici di Inlet e Outlet è stato necessario aggiornare, per ciascun punto operativo simulato, i file in input contenenti i profili di pressione nei condotti di aspirazione e scarico (dati ricevuti dalle analisi sperimentali), oltre alla composizione chimica delle specie presenti.

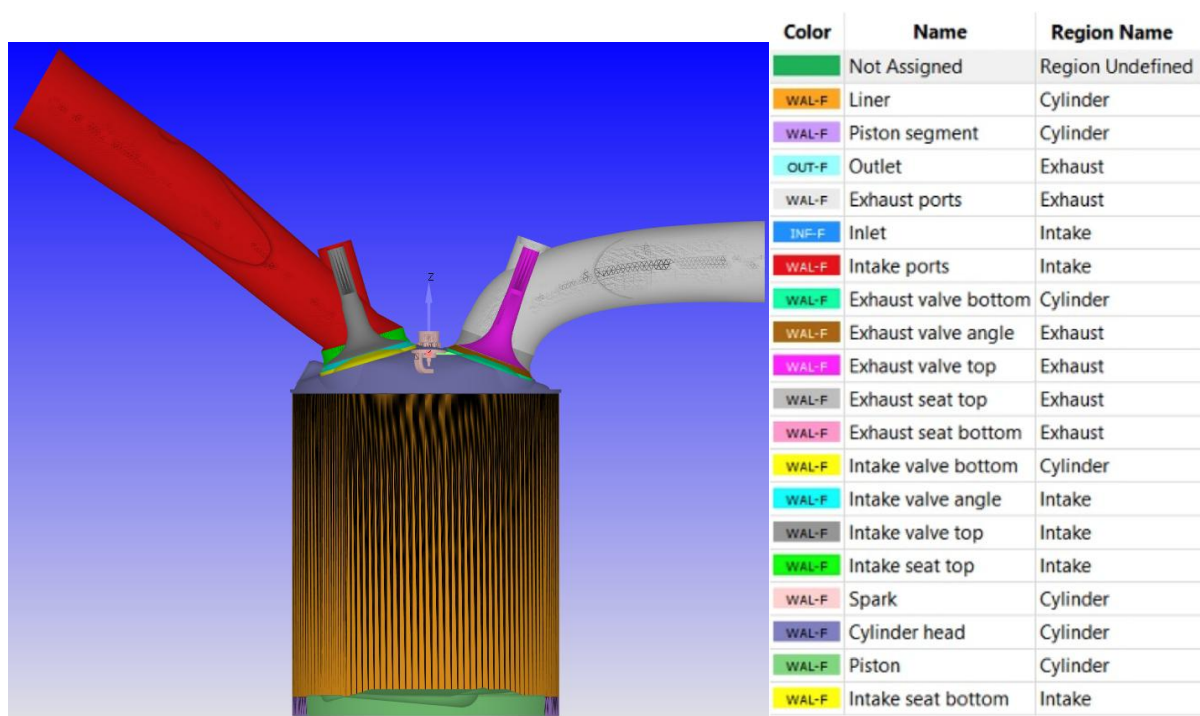


Figura 14, sezione della geometria del motore EP6DT importata in CONVERGE, con evidenziata l'assegnazione delle superfici alle boundary e dei volumi alle region

In seguito, si è passati all'assegnazione delle condizioni iniziali ad ognuna delle tre regioni.

Per quanto riguarda la pressione iniziale da assegnare, il valore veniva letto dai grafici sperimentali disponibili per ogni punto ed assegnato il valore di pressione presente a 90° di angolo di manovella.

La temperatura iniziale di aspirazione e scarico è stata imposta a partire dai dati sperimentali, mentre quella del cilindro è stata inizialmente stimata sulla base dei valori misurati allo scarico e successivamente calibrata, confrontando in post-processing le curve del primo e del secondo ciclo di combustione. Quest'ultimo, poco influenzato dalle condizioni iniziali, è stato assunto come riferimento.

Infine, sono state impostate le frazioni massiche di idrogeno e ammoniaca, che variavano da punto a punto in funzione della miscela, ed il rapporto di equivalenza Φ caratteristico di ciascun punto operativo. A partire da questi valori, sono stati calcolati i prodotti della combustione, anch'essi espressi come frazioni massiche per ciascuna specie, assegnando condizioni di "burned" alle regioni *cylinder* ed *exhaust*, e di "unburned" alla regione *intake*.

Poiché il modello ECFM non effettua una risoluzione diretta della chimica di combustione, ma si basa su tabelle pre-elaborate, è stato importato un file TLF_TABLE contenente i valori di velocità laminare, variabili al variare della miscela.

5.2 Configurazione della mesh

Passando alla trattazione sulle impostazioni di simulazione, la risoluzione di base della mesh usata è di 4 mm (Δx_{base}) lungo ciascuna direzione cartesiana. Poiché tale valore potrebbe risultare troppo grossolano in determinati punti della simulazione si è proceduti all'impostazione di un raffinamento locale (*fixed embedding*) in regioni geometriche di interesse. La risoluzione introdotta è controllata dal parametro *embed_scale*, utilizzando la seguente correlazione per calcolare la dimensione della cella nel volume di embedding:

$$\Delta x_{embed} = \frac{\Delta x_{base}}{2^{embed_scale}} \quad (30)$$

Nel presente lavoro, il fixed embedding è stato applicato in più aree chiave del motore.

In zona candela si creano due sfere concentriche attorno alla scintilla (come evidenziato in *Figura 15*), la prima di raggio 0,005m con *embed_scale* = 5, la seconda di 0,011m con *embed_scale* = 4 (più distante dalla scintilla e quindi con mesh meno fitta) entrambe attive da -50° CA fino a 10° CA per ogni ciclo motore. Ciò consente di garantire un'elevata risoluzione nella fase di accensione e di *early flame development*, in cui la corretta cattura della struttura della fiamma è cruciale per la successiva propagazione turbolenta.

Nei pressi delle sedi di valvole di aspirazione e scarico si sono impostati dei cilindri di riferimento lungo l'asse dei condotti rispettivamente tra 330° CA-625° CA per l'intake e 125° CA-415° CA per l'exhaust con *embed_scale* = 3, per risolvere i moti vorticosi, le separazioni locali e l'effetto della turbolenza in apertura/chiusura.

Su pistone, liner e testata un embedding permanente a livello a *embed_scale* = 2, al fine di risolvere meglio gli strati limite e gli scambi termici parete-gas.

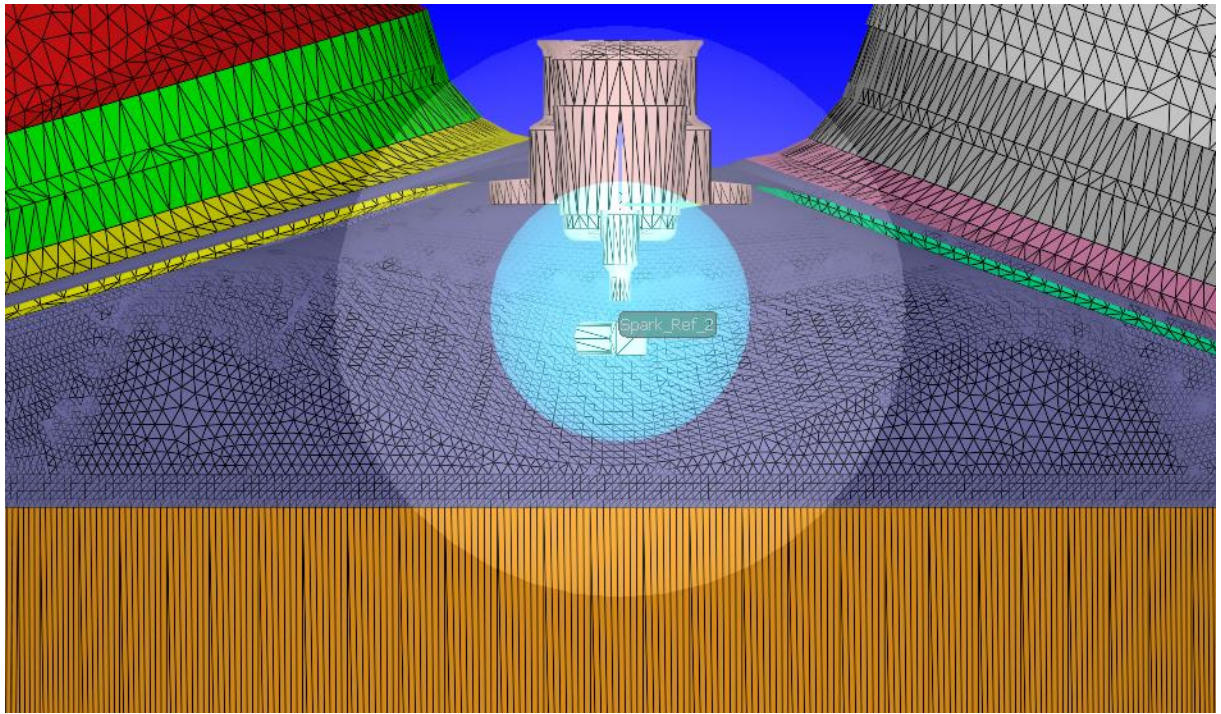


Figura 15, particolare del raffinamento statico attorno alla candela

A tale impostazione si è aggiunto l'*Adaptive Mesh Refinement* (AMR), il quale impone un raffinamento dinamico che permette alla mesh di adattarsi automaticamente durante la simulazione concentrando la risoluzione nelle aree in cui si sviluppano forti variazioni locali e alleggerendola quando la soluzione diventa più uniforme.

Nell'applicazione al caso studiato si sono seguiti due criteri: il primo, attivo in tutte e tre le regioni, con livello massimo di raffinamento massimo 3 permanente, basato sulla velocità della turbolenza sub-grid (SGS) che permette una migliore risoluzione nelle aree caratterizzate da elevata intensità turbolenta. Il secondo, con livello di raffinamento massimo 4 e attivo solo nel cilindro, riguarda la *progress variable* (descritta nella Sezione 3.2) nelle celle in cui il suo valore si attesta tra 0,05 e 0,9, in una finestra temporale tra i -50° CA e i 100° CA per ciclo motore. Così facendo si riuscirà a seguire con alta risoluzione il fronte di fiamma, catturando correttamente lo spessore della zona di reazione.

Un esempio dell'effetto combinato di *fixed embedding* e AMR, tratto da una simulazione avente *spark advance* pari a -45° CA, è visibile in Figura 16. In (a), a -50° CA, il raffinamento è confinato attorno alla candela grazie al fixed embedding sferico, in (b), a 0° CA, si sommano l'effetto residuo dell'embedding e l'attivazione dell'AMR basato sulla variabile di progresso ed infine in (c), a 20° CA, l'embedding in zona candela è disattivato mentre il fronte di fiamma è ormai completamente seguito dall'AMR.

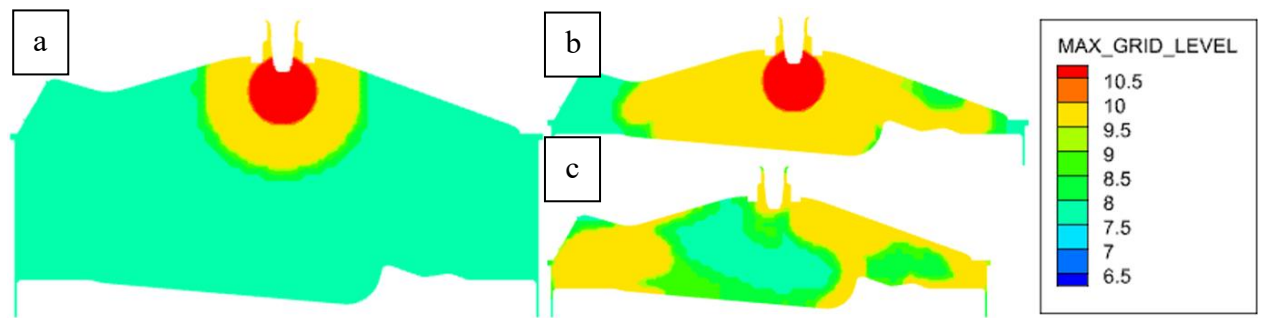


Figura 16, livello massimo di raffinamento della mesh raggiunto in ogni cella in camera di combustione in (a) a -50° CA, (b) a 0° CA e (c) a 20° CA

Tale approccio consente quindi di concentrare la risoluzione dove la fisica lo richiede, riducendo errori numerici nella previsione della velocità di fiamma e nella riproduzione della turbolenza locale, senza compromettere eccessivamente i costi computazionali.

5.3 Modello di accensione e calibrazione di α_{stretch}

Nel file *issim.in* si è impostato l'istante di accensione, in termini di angolo di manovella. L'ISSIM (*Imposed Stretch Spark Ignition Model*) è un modello di accensione che spesso si accoppia con ECFM per descrivere l'innesco della combustione. Esso combina la rappresentazione del circuito elettrico della scintilla con la formazione del nucleo di fiamma, simulando sia la deposizione di energia elettrica sia la crescita della superficie di fiamma.

Per ultimo, si è impostato il valore di α_{stretch} (la cui interpretazione è stata descritta nel *Paragrafo 3.2.1*). Nelle simulazioni iniziali si è preferito partire con un valore di α_{stretch} pari a 0,09, risultato complessivamente come un coefficiente medio affidabile nel corso delle diverse prove. Esso è stato quindi usato sia come parametro di confronto tra i vari punti, per valutare la velocità della combustione, sia come primo riferimento per le successive calibrazioni. Proprio del rapporto che lega α_{stretch} con la percentuale di idrogeno presente in miscela si discuterà in maniera più approfondita nel successivo capitolo.

6 Analisi delle simulazioni 3D

Dopo aver analizzato i riferimenti teorici a supporto delle simulazioni e aver descritto l'impostazione del modello numerico e le scelte modellistiche adottate, si passa all'analisi dei risultati ottenuti. Tra i diversi casi studiati, in questa tesi si è scelto di focalizzare l'attenzione sull'andamento delle grandezze principali al variare della percentuale di idrogeno nella miscela, mantenendo costanti le condizioni riassunte in *Tabella 5*.

Velocità del motore	1500 rpm
Temperatura all'aspirazione	50°C
Pressione all'aspirazione	1.2 bar

Tabella 5, parametri mantenuti costanti durante le simulazioni analizzate nel Capitolo 6

In particolare, sono stati analizzati sei casi studio con $\Phi=1$, nei quali la frazione di idrogeno in volume nella miscela è pari rispettivamente al 0%, 5%, 10%, 19%, 40% e 60%, e cinque casi per $\Phi=0.8$, con idrogeno pari a 5%, 10%, 20%, 40% e 60%, mentre la parte restante è costituita da ammoniaca.

Le specifiche del setup sperimentale (le cui geometria è stata implementata su CONVERGE) e le condizioni operative adottate sono descritte nel *Capitolo 1*, e riportate rispettivamente in *Tabella 2* e *Tabella 3*.

I grafici esposti nelle successive sezioni mostrano:

- l'andamento della pressione all'interno del cilindro,
- il tasso apparente di rilascio di calore (*Apparent Heat Release Rate*, AHRR), calcolato tramite l'applicazione della prima legge della termodinamica con la seguente formula:

$$AHRR = \frac{\partial Q_a}{\partial \theta} = \frac{k}{k-1} p \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{k-1} V \frac{dp}{d\theta} \quad (31)$$

- la frazione di massa bruciata (*Mass Fraction Burned*, MFB), ottenuto partendo dal *Cumulative Heat Release* (CHR), tramite le seguenti equazioni:

$$CHR = \int_{\theta_{in}}^{\theta_{fin}} AHRR d\theta \quad (32)$$

$$MFB(\theta) = \frac{CHR_{\theta}}{CHR_{MAX}} \quad (33)$$

- il diagramma di Borghi–Peters, utilizzato per l’analisi del regime di combustione e per il confronto con le caratteristiche turbolente del flusso

Nei primi tre grafici si è riportato in rosso il caso numerico simulato e calibrato ed in verde il caso comparativo fisso con $\alpha_{stretch}$ pari a 0.09, in grigio le tracce sperimentali ciclo per ciclo, che evidenziano la variabilità propria del processo di combustione ed in blu il valore medio di quest’ultimi. I grafici di pressione e AHRR sono presentati in una forma normalizzata.

6.1 Simulazioni con $\Phi = 1$

6.1.1 Caso 117 – Miscela con 0% di H_2

- Percentuale di idrogeno in volume: 0%
- Spark Timing: -50° CA
- IMEP: 8.4 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.03

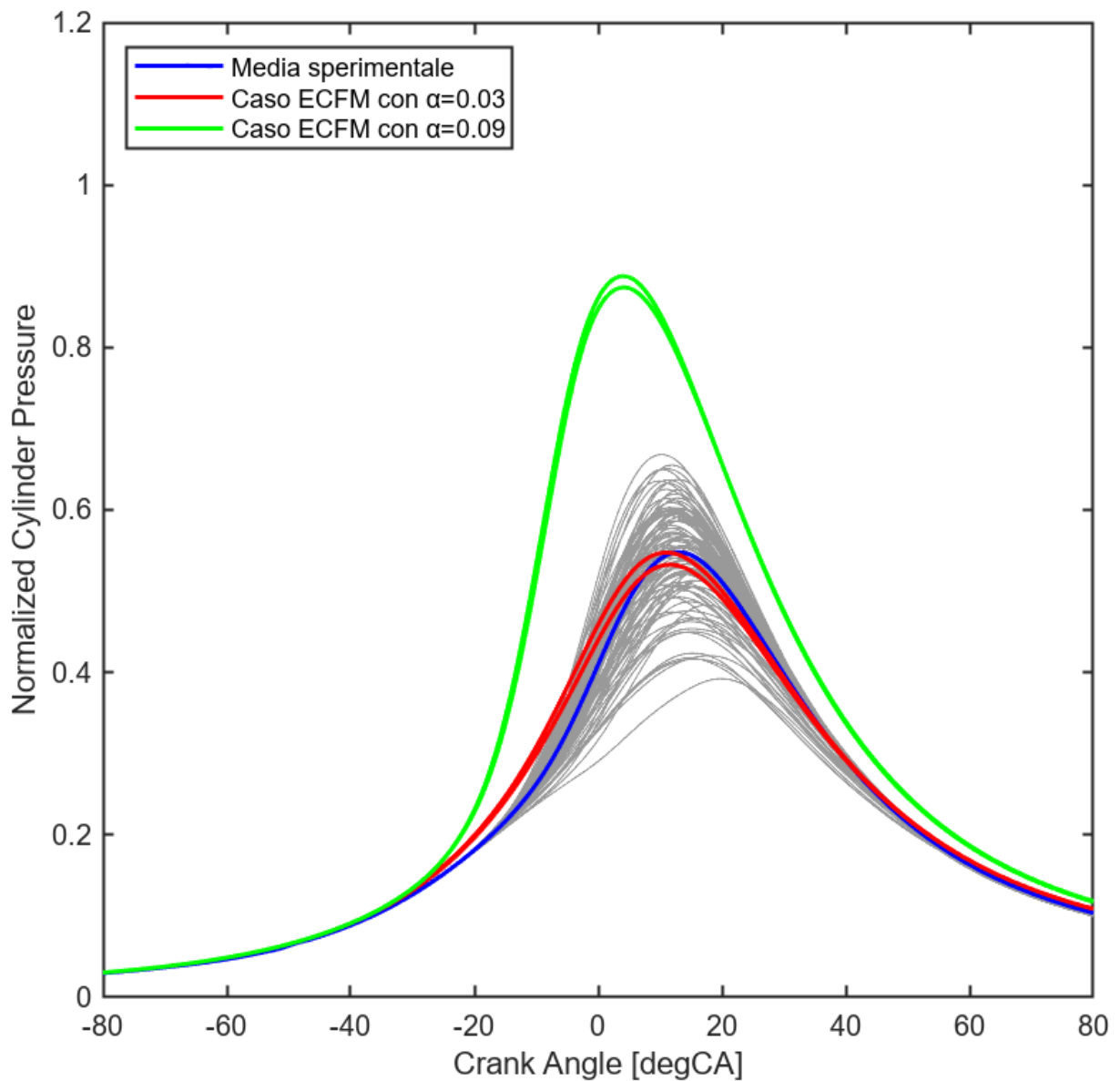


Figura 17, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$

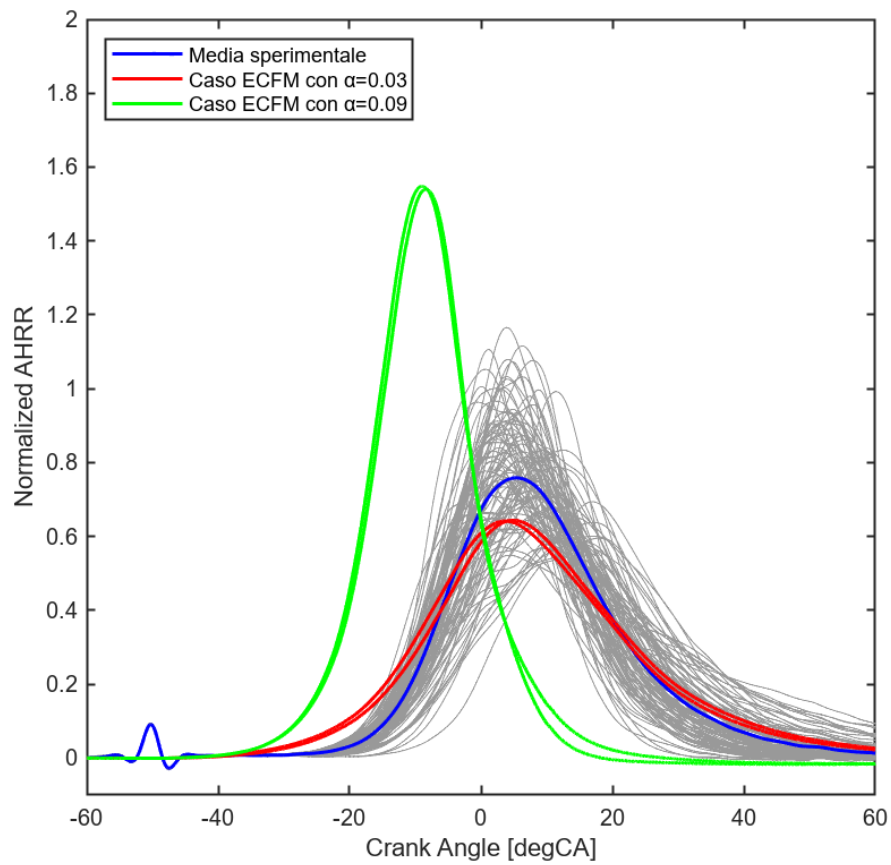


Figura 18, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$

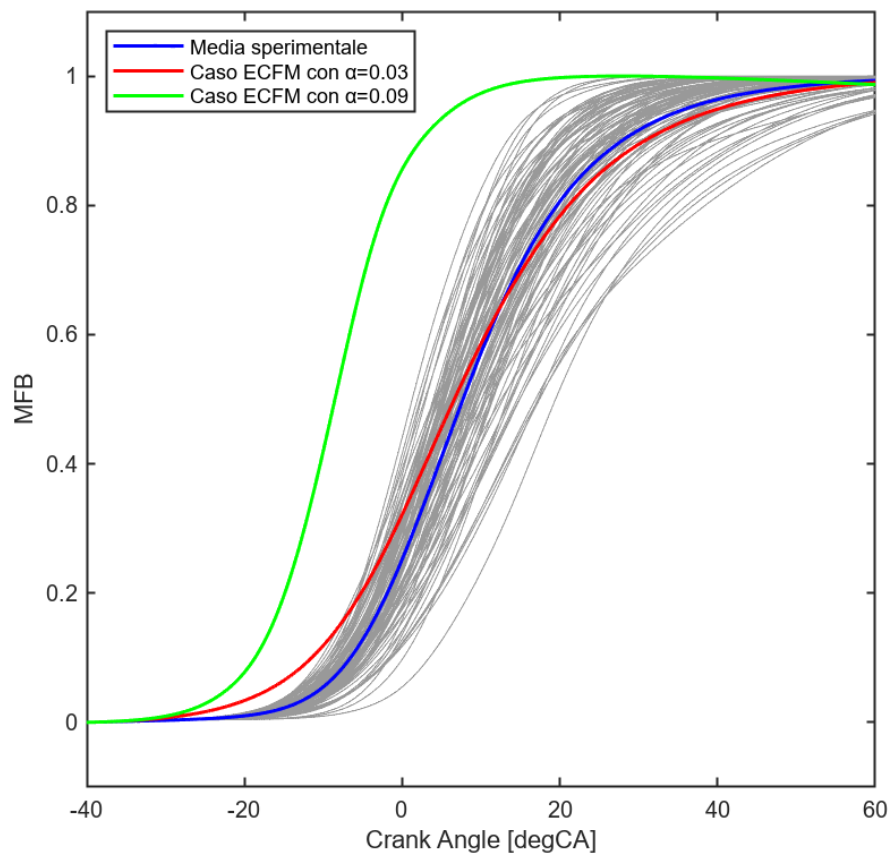


Figura 19, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$

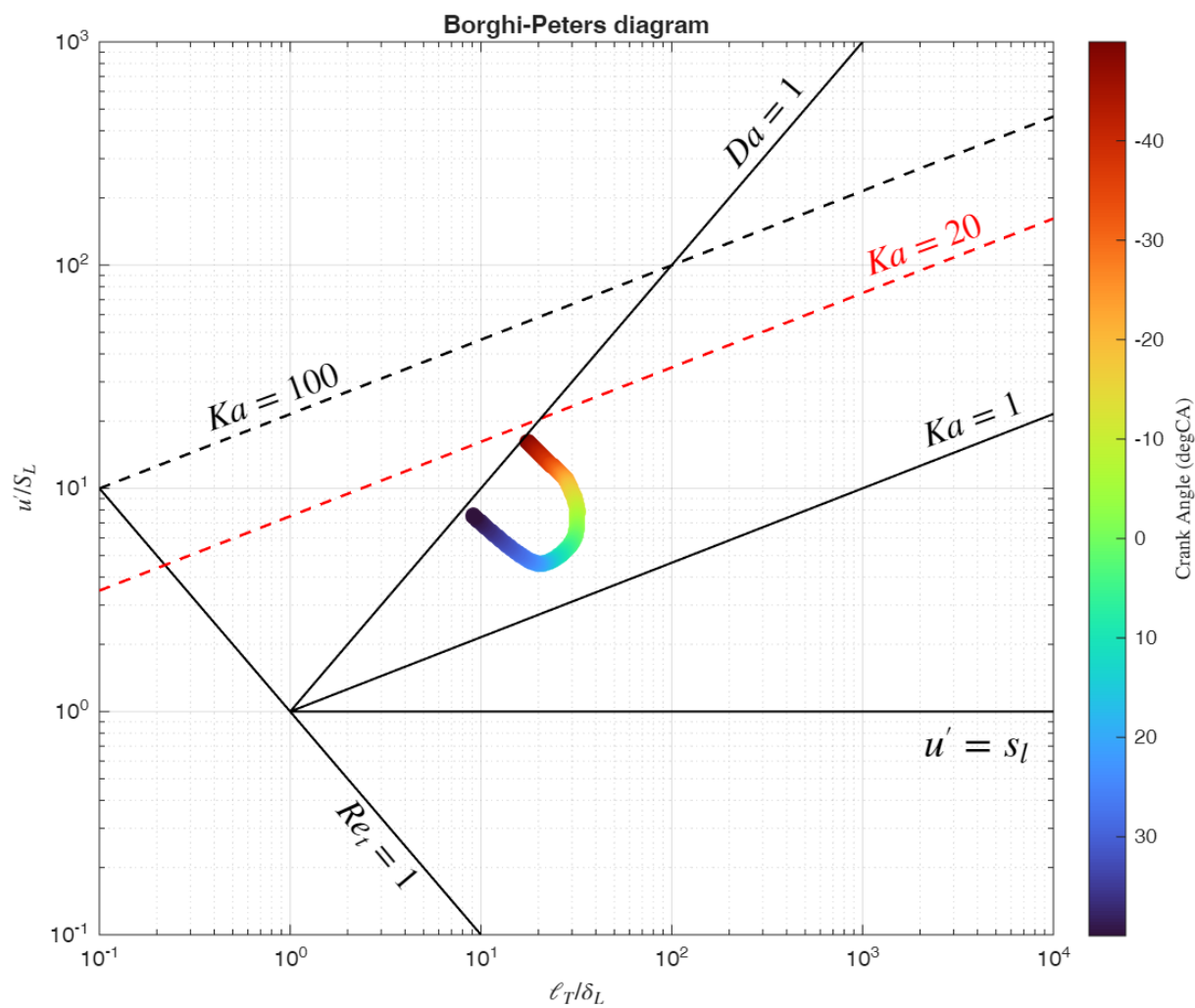


Figura 20, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=0\%$, $\Phi = 1$

6.1.2 Caso 124 – Miscela con 5% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 5%
- Spark Timing: -40° CA
- IMEP: 8.7 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.06

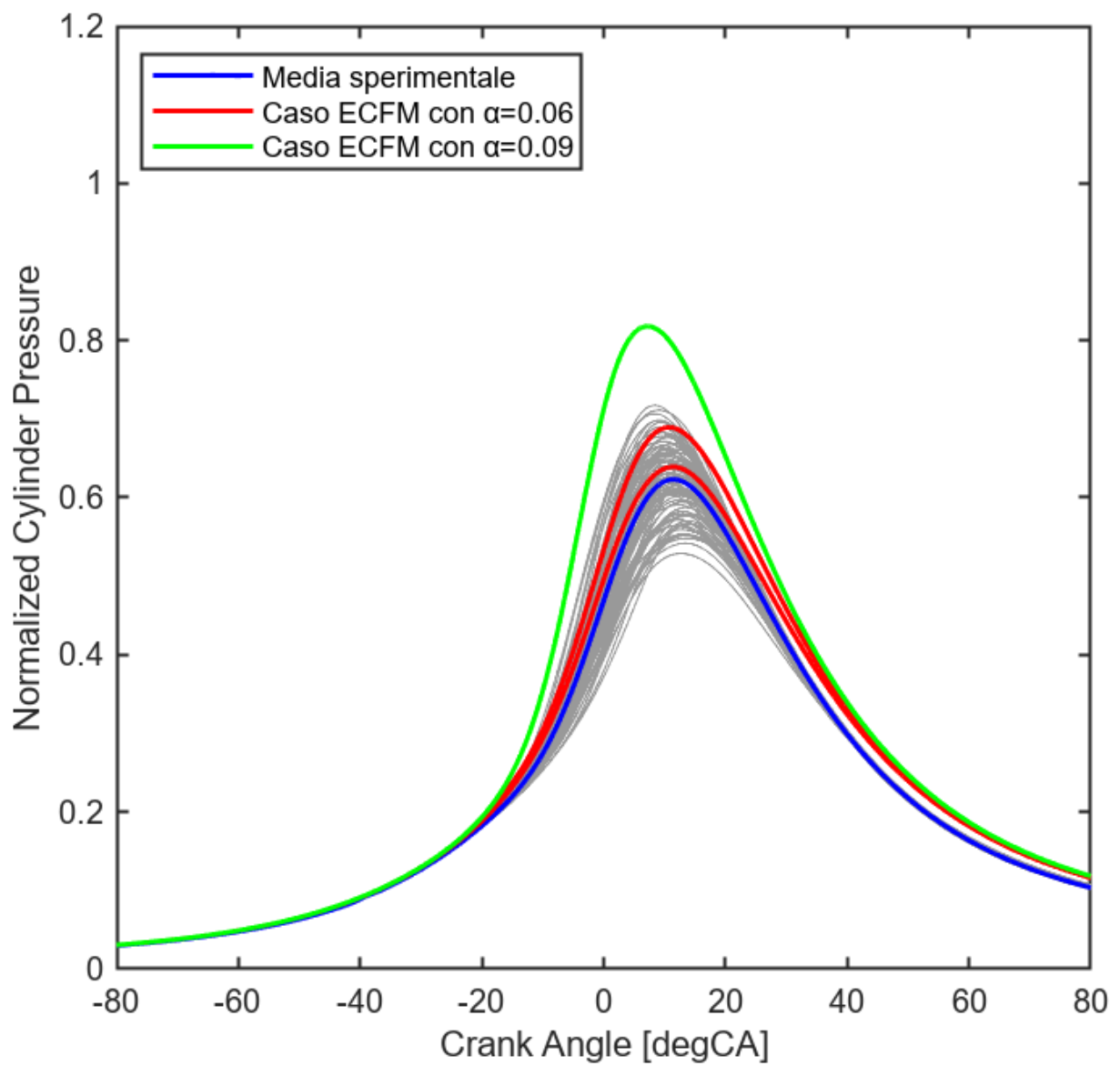


Figura 21, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=5%, $\Phi = 1$

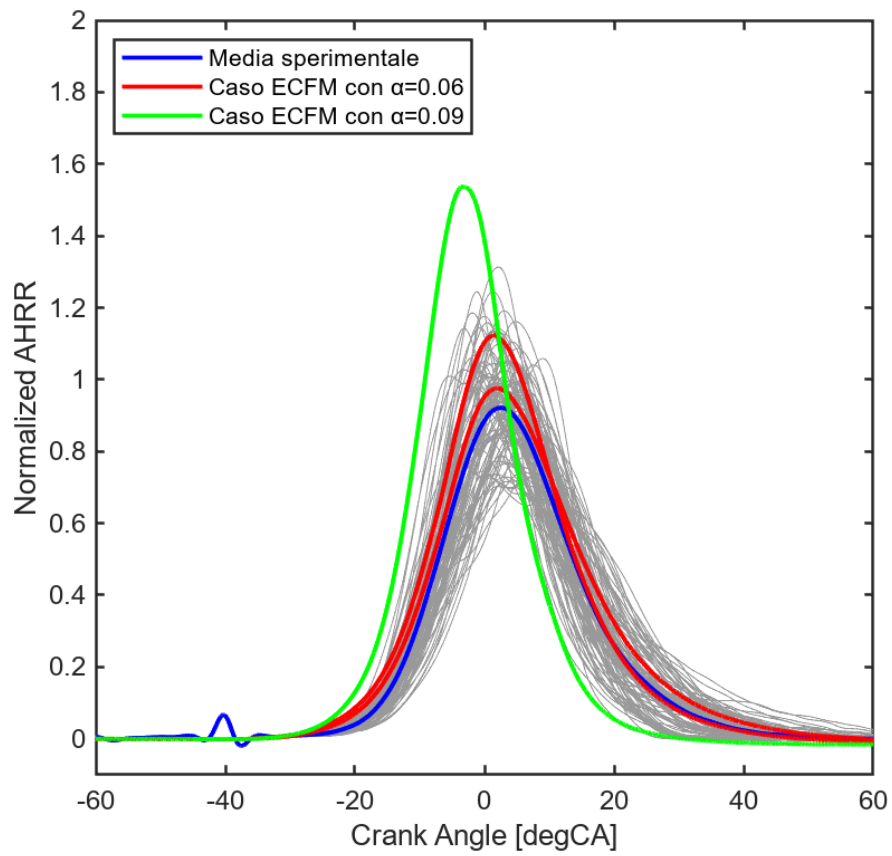


Figura 22, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 1$

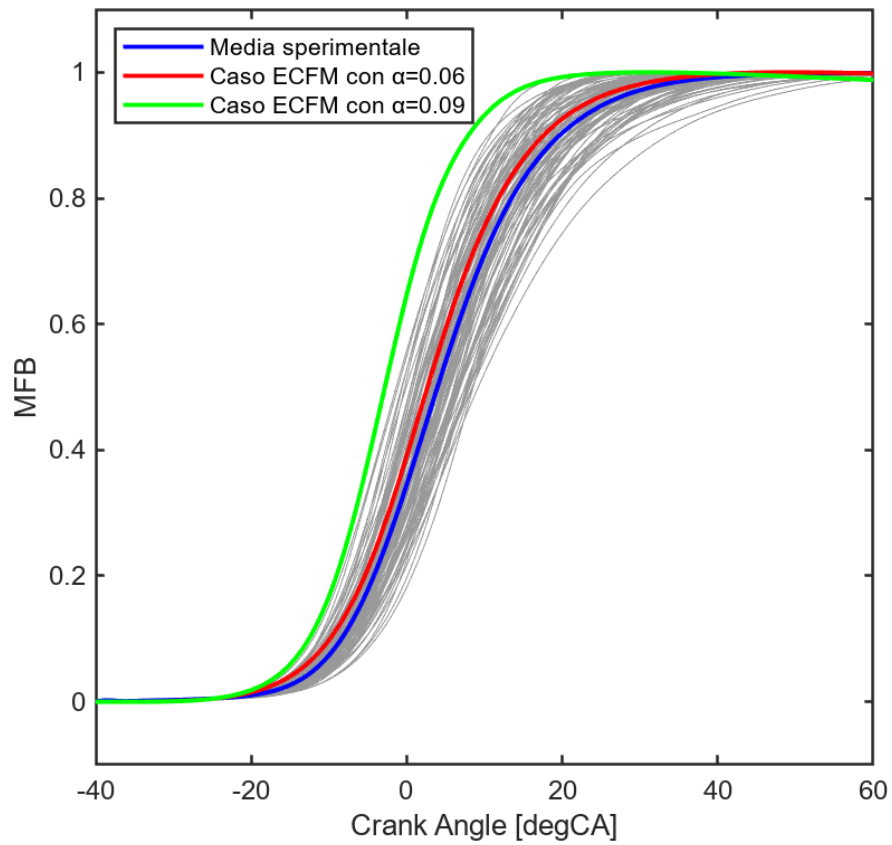


Figura 23, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 1$

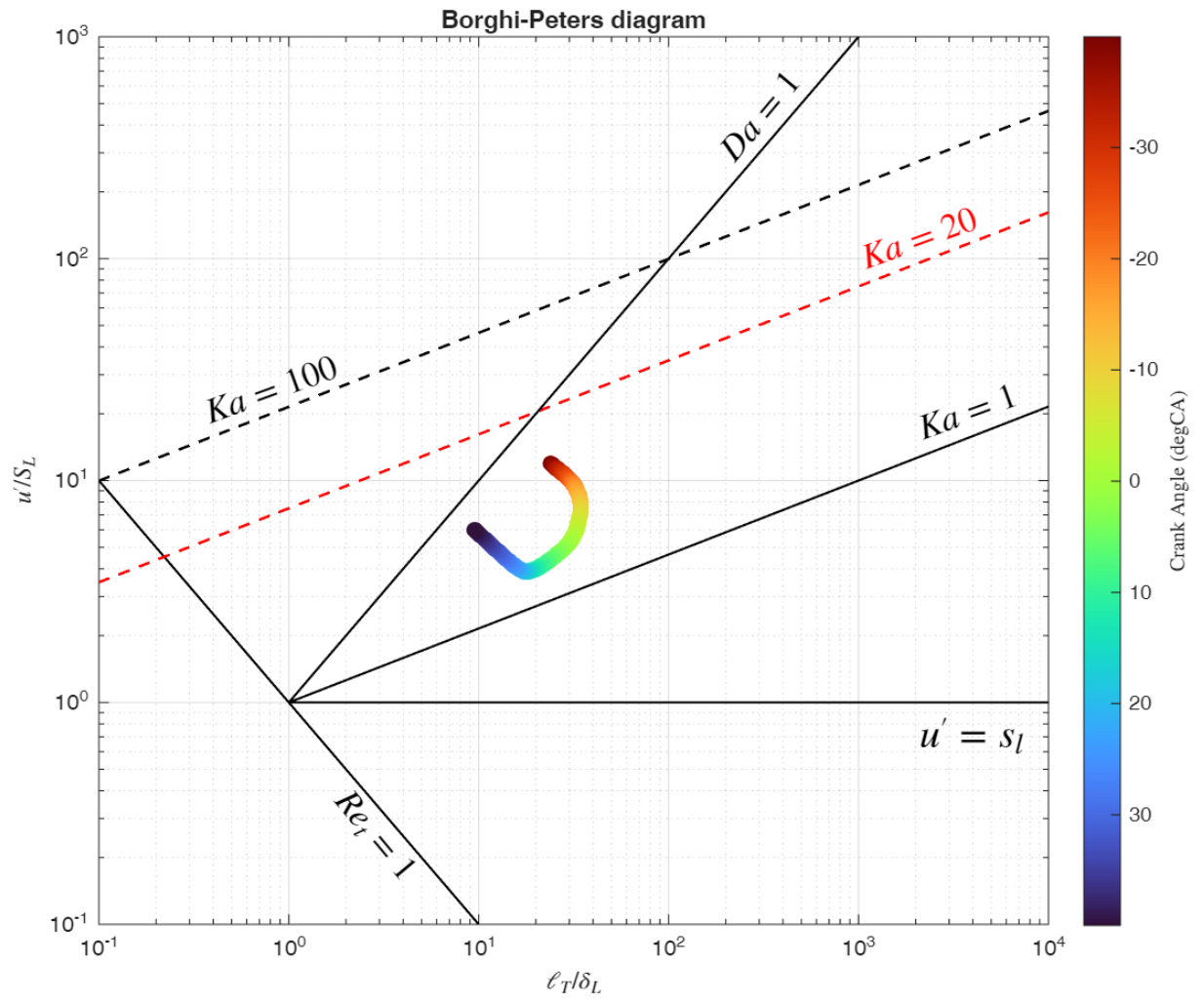


Figura 24, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 1$

6.1.3 Caso 131 – Miscela con 10% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 10%
- Spark Timing: -35° CA
- IMEP: 8.7 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.06

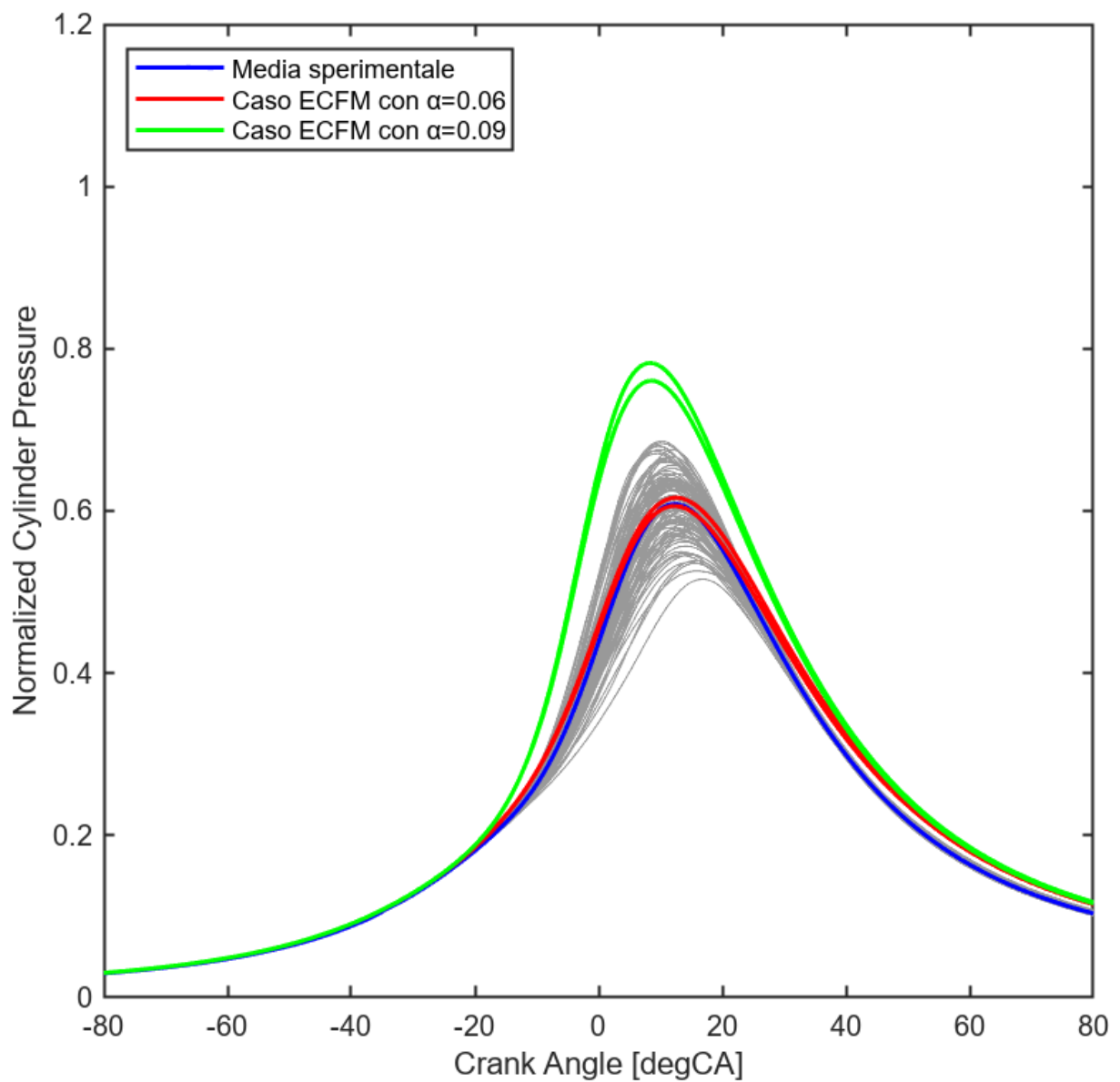


Figura 25, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=10%, $\Phi = 1$

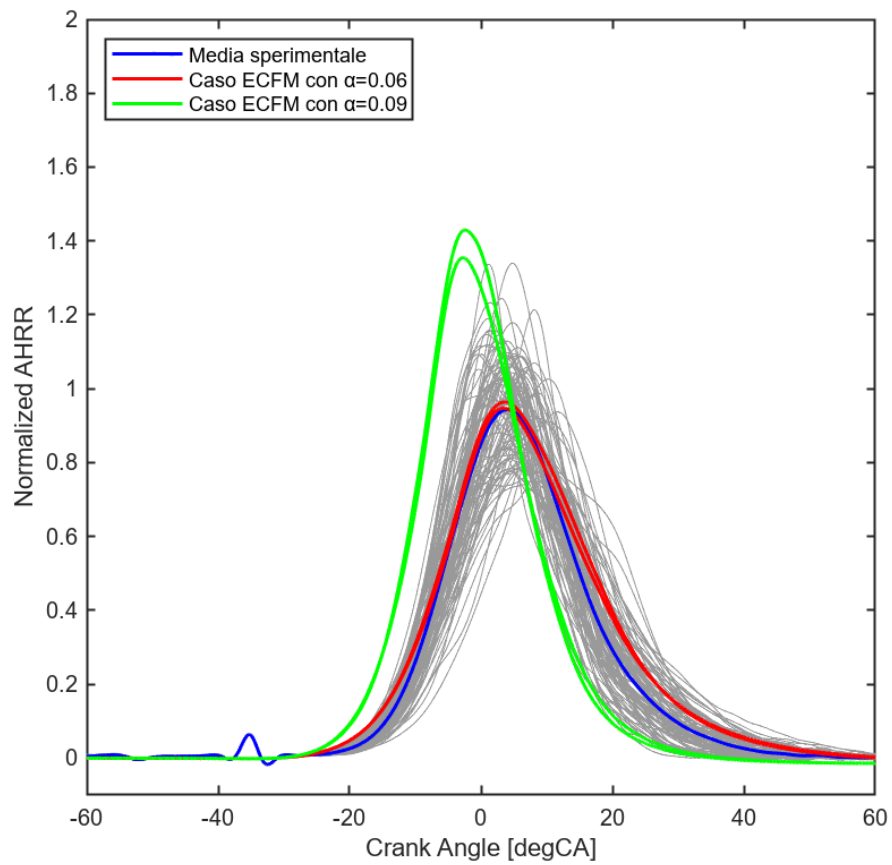


Figura 26, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con %H₂=10%, $\Phi = 1$

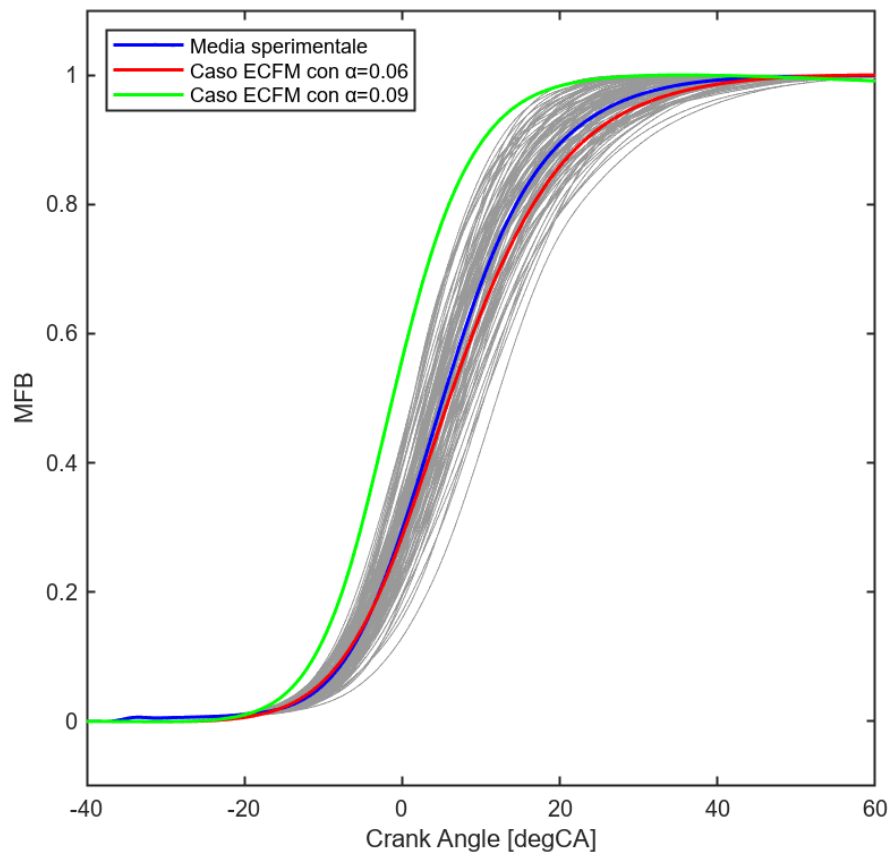


Figura 27, andamento Mass Fraction Burned, Caso con %H₂=10%, $\Phi = 1$

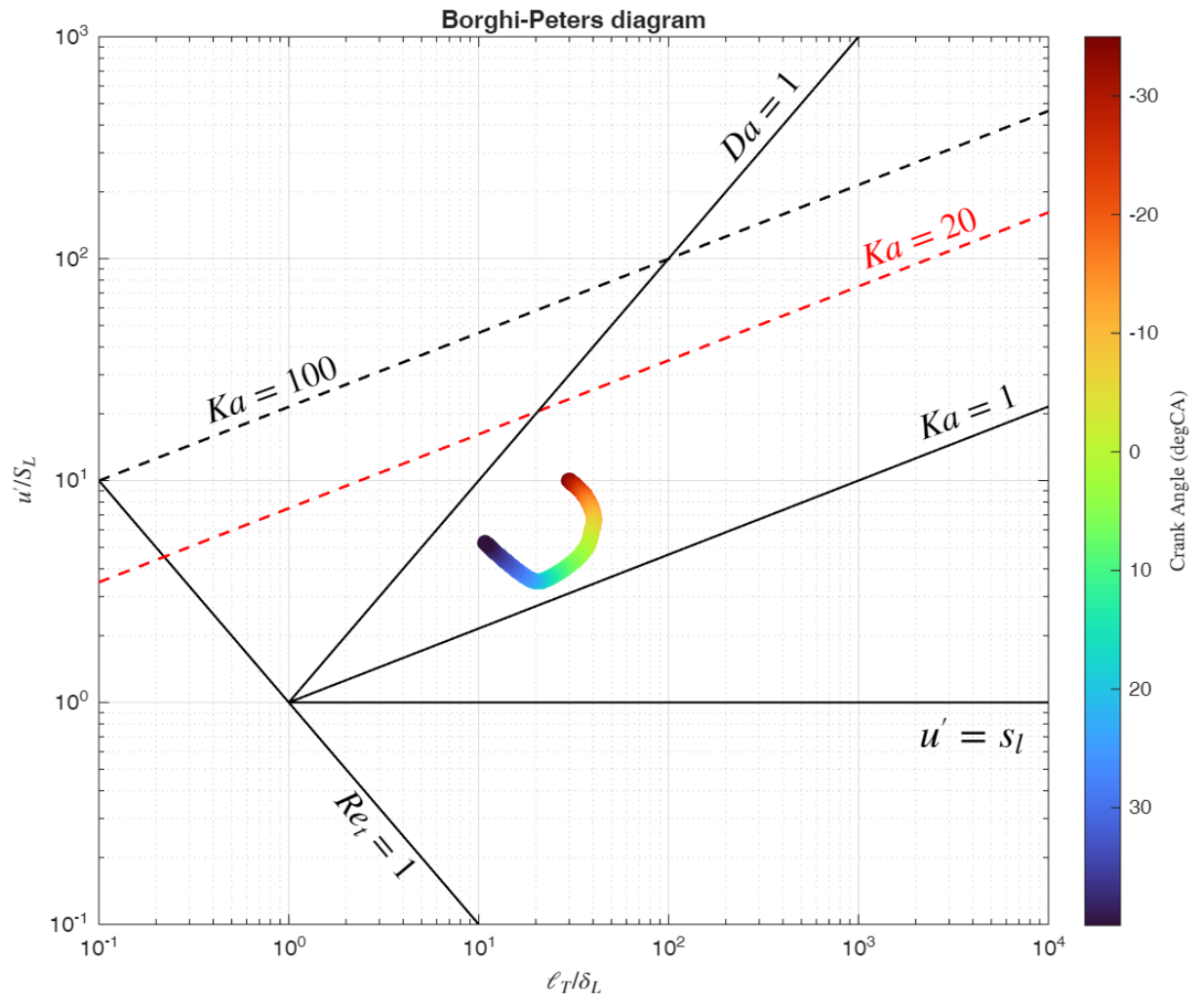


Figura 28, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=10\%$, $\Phi = 1$

6.1.4 Caso 138 – Miscela con 19% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 19%
- Spark Timing: -27° CA
- IMEP: 8.8 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.07

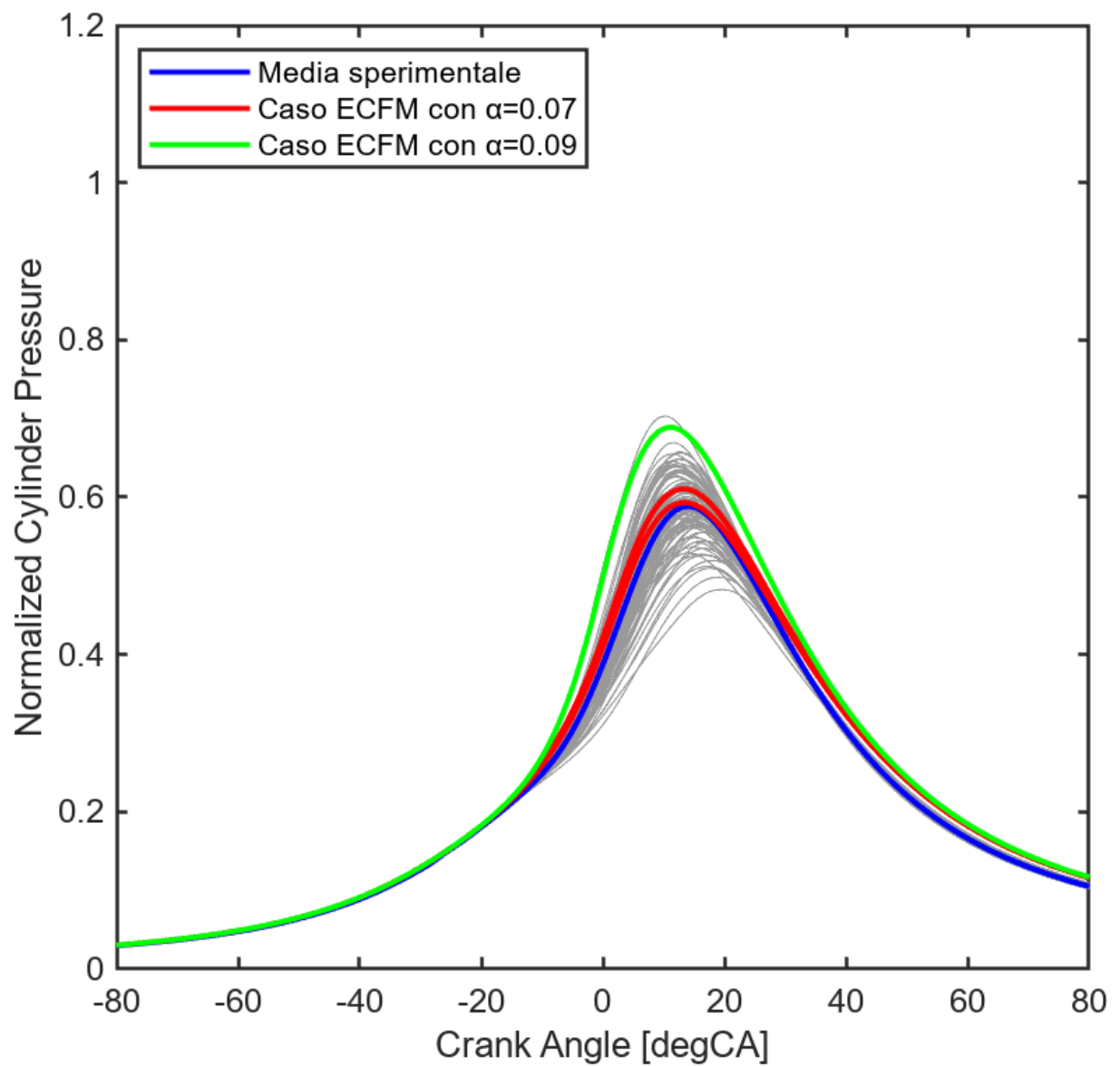


Figura 29, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=19%, $\Phi = 1$

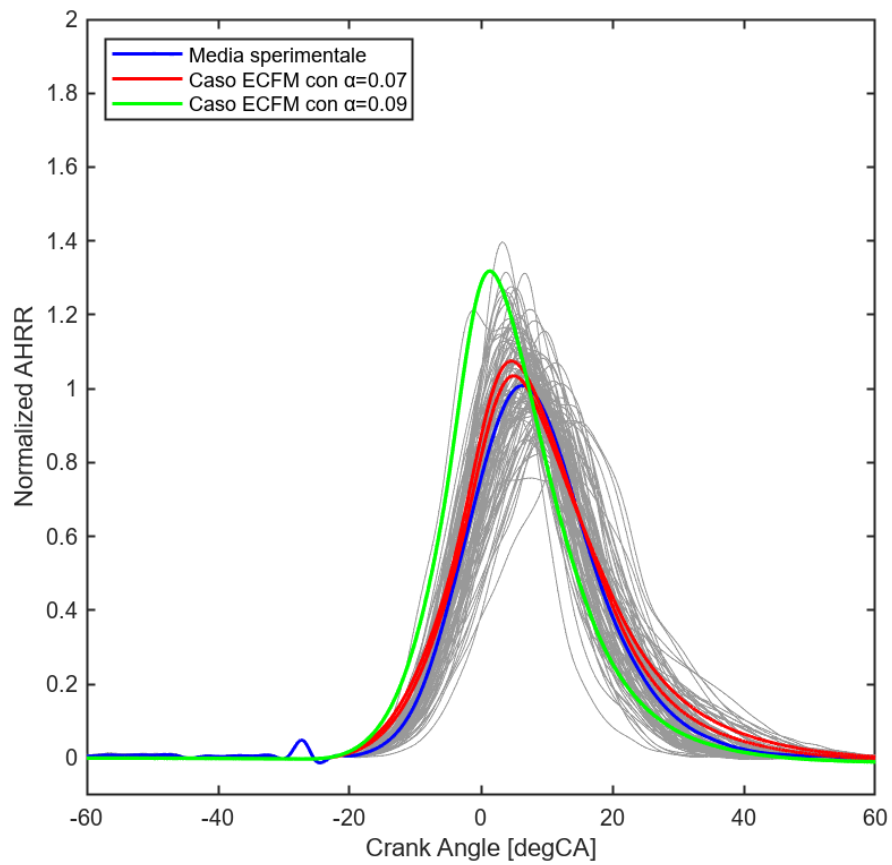


Figura 30, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=19\%$, $\Phi = 1$

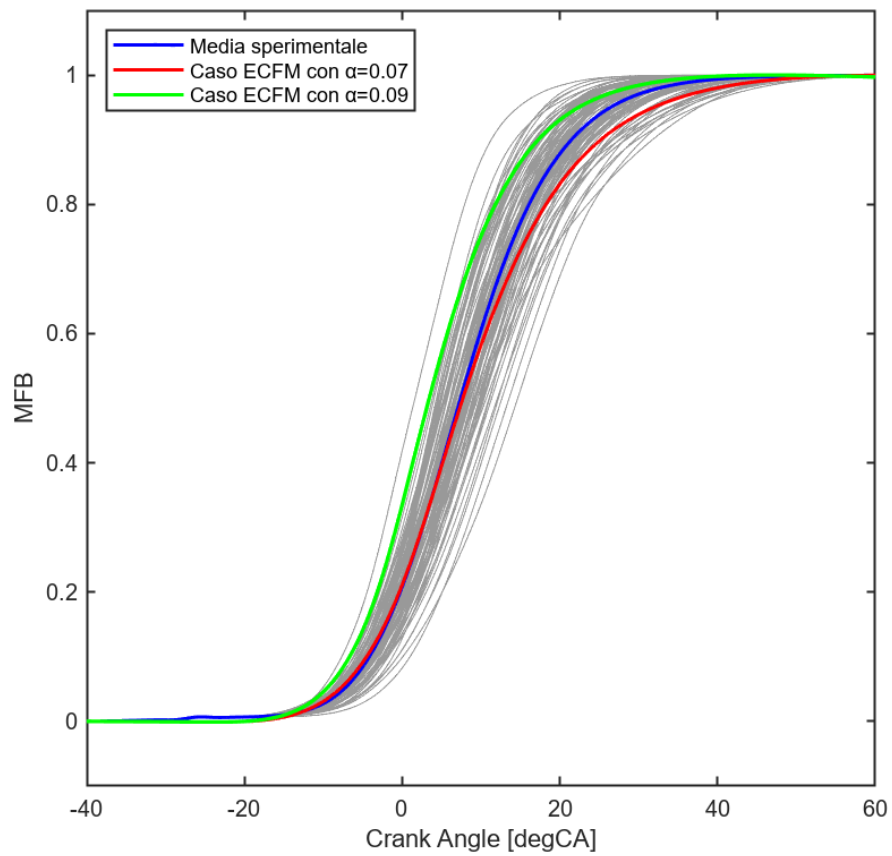


Figura 31, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=19\%$, $\Phi = 1$

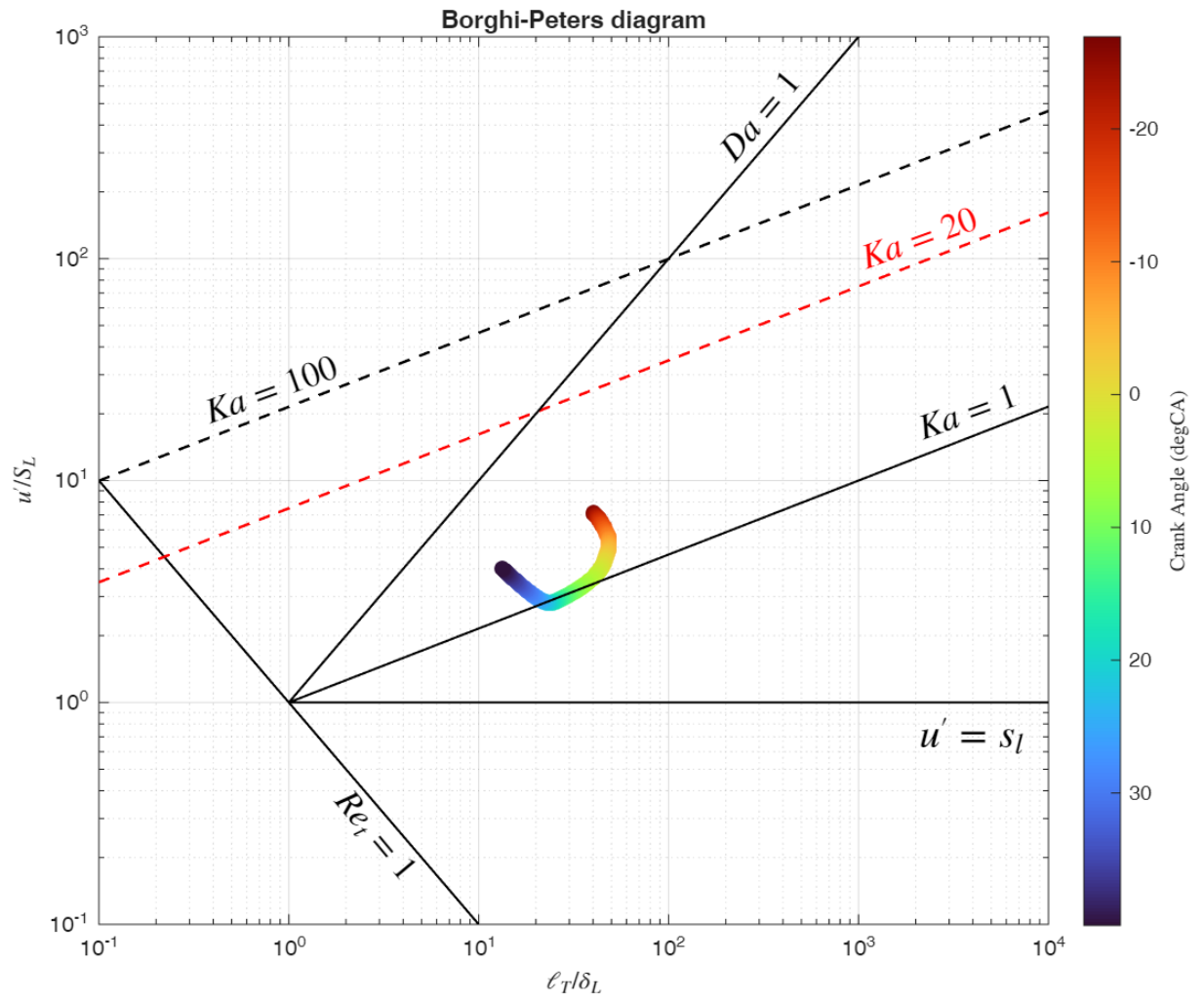


Figura 32, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=19\%$, $\Phi = 1$

6.1.5 Caso 145 – Miscela con 40% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 40%
- Spark Timing: -20° CA
- IMEP: 8.4 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.09

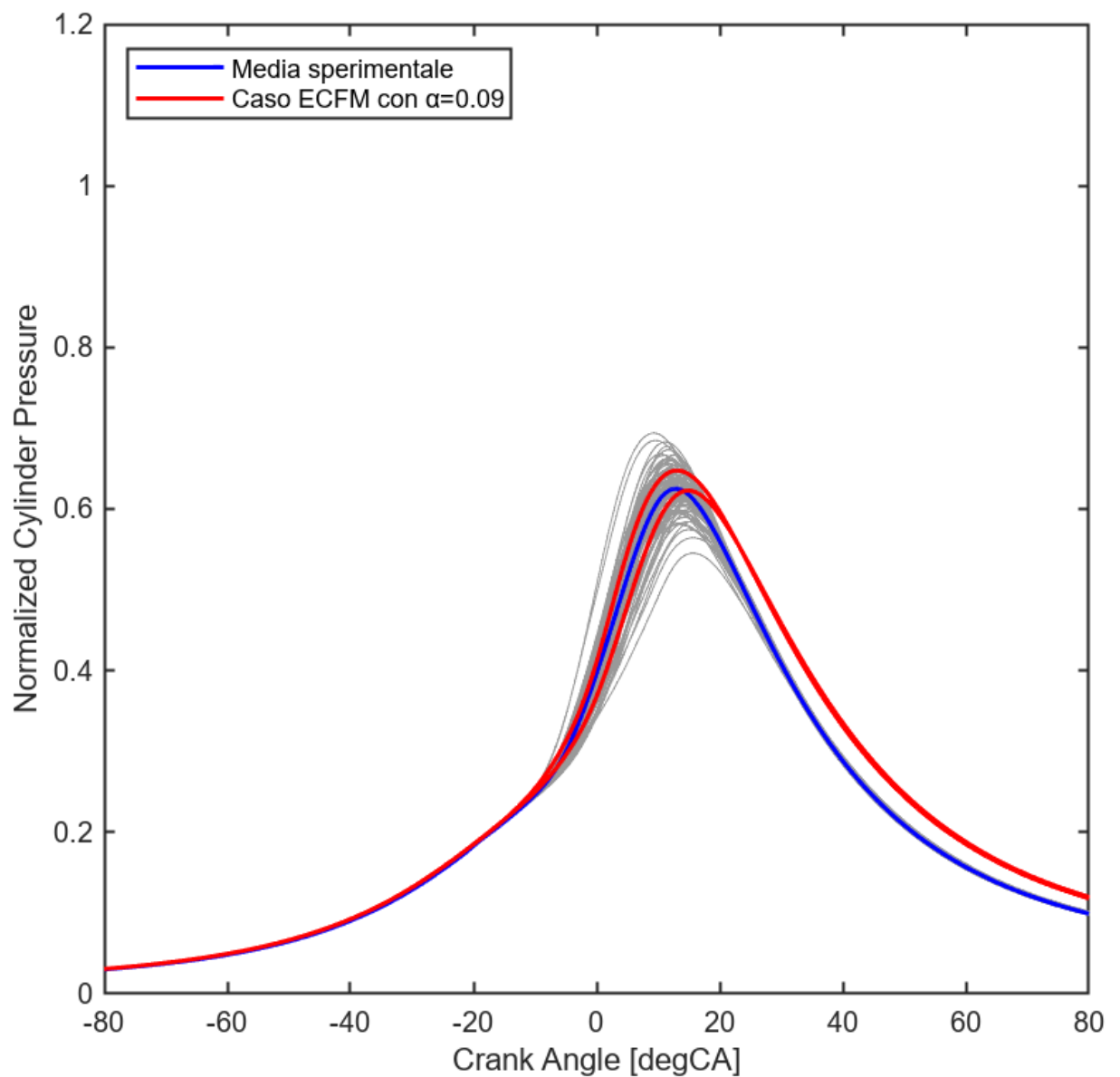


Figura 33, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=40%, $\Phi = 1$

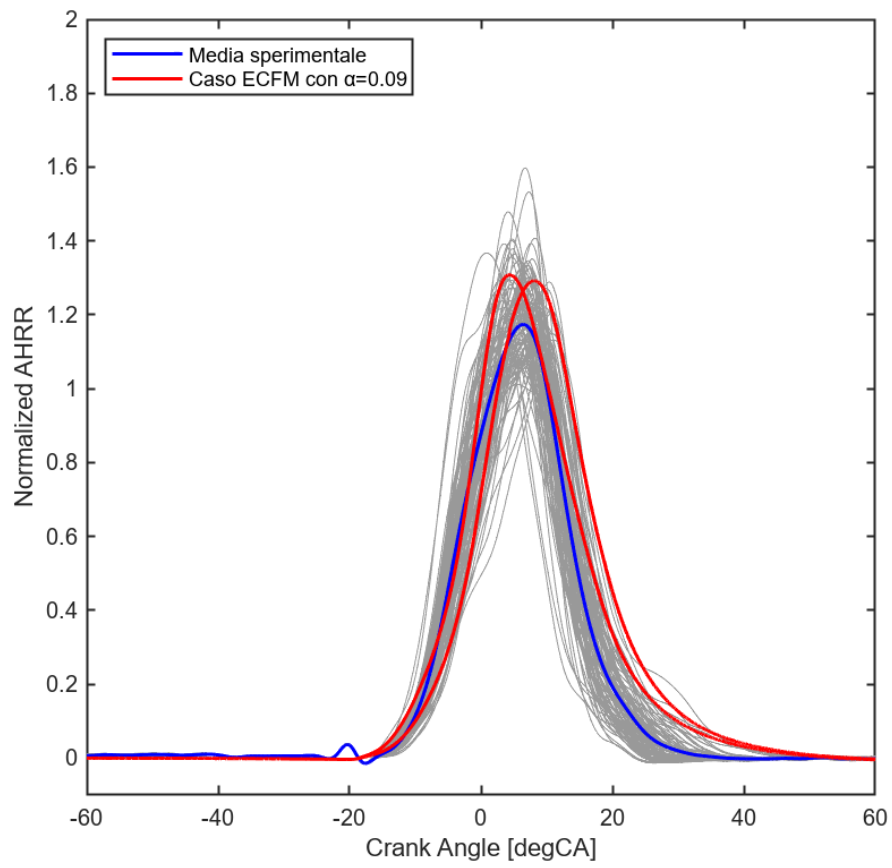


Figura 34, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=40\%$, $\Phi = 1$

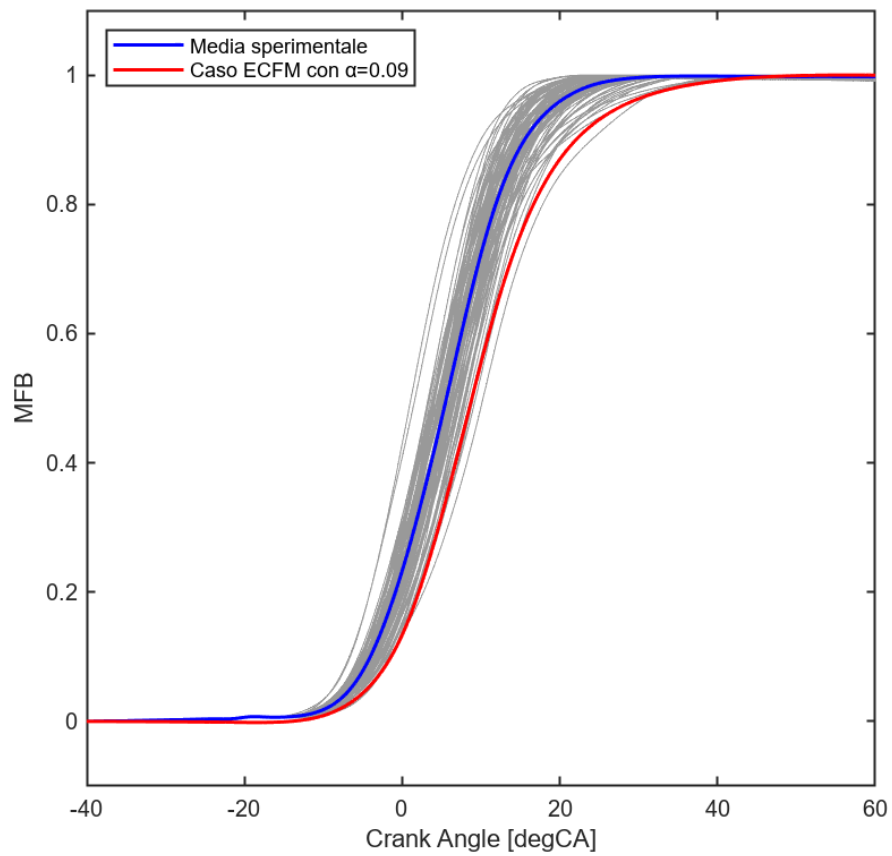


Figura 35, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=40\%$, $\Phi = 1$

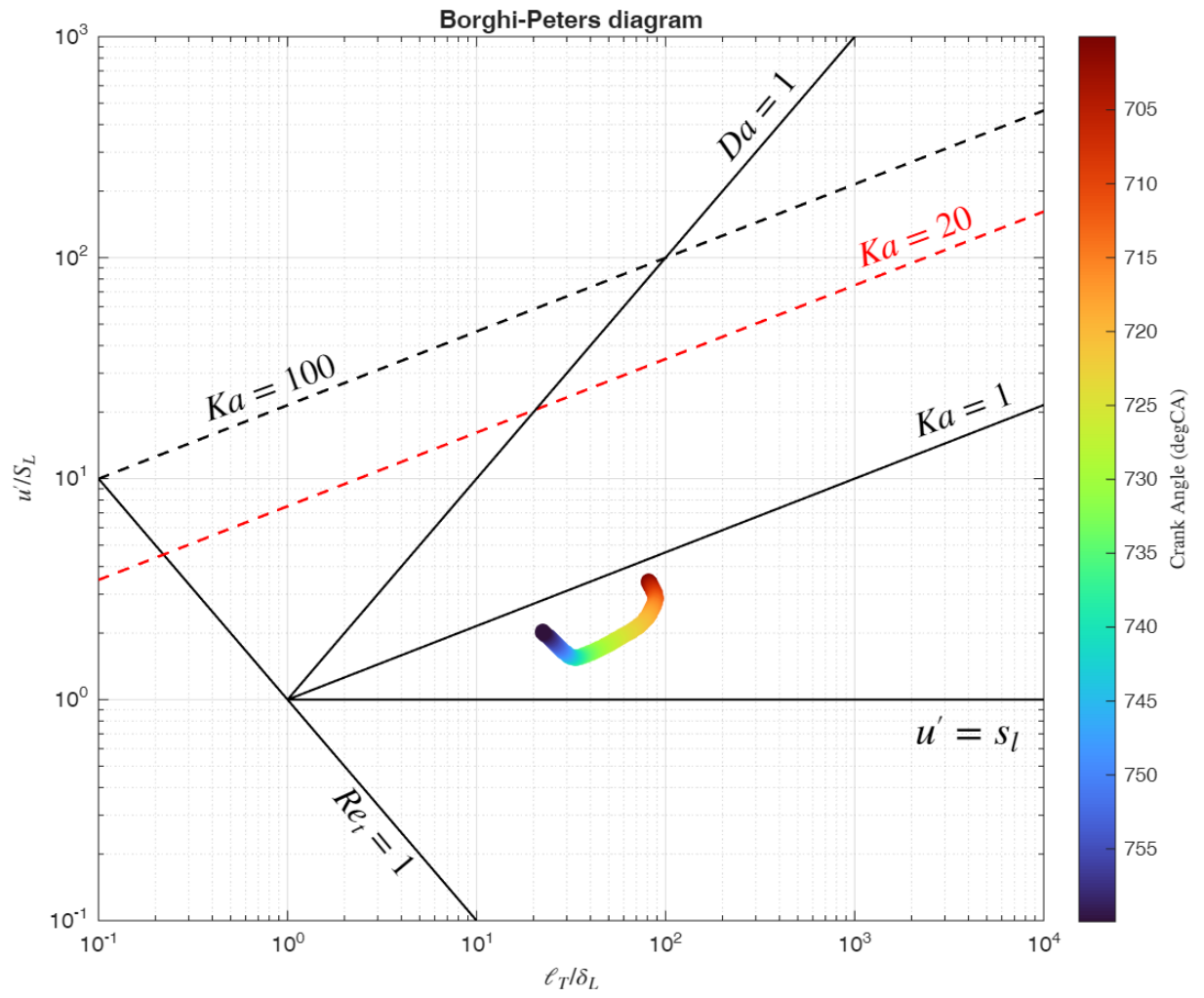


Figura 36, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=40\%$, $\Phi = 1$

6.1.6 Caso 152 – Miscela con 60% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 60%
- Spark Timing: -13° CA
- IMEP: 8.3 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.12

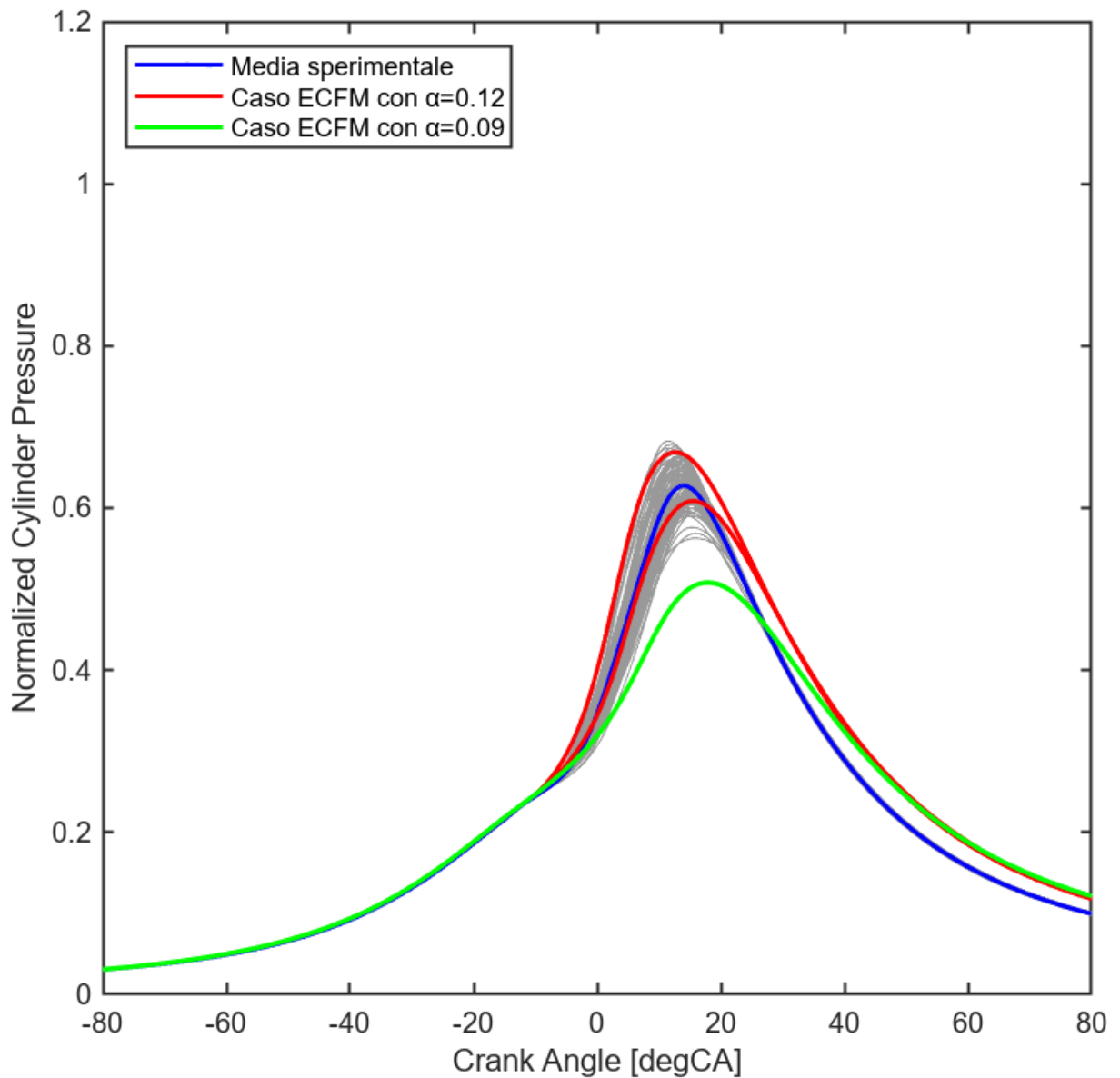


Figura 37, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=60%, $\Phi = 1$

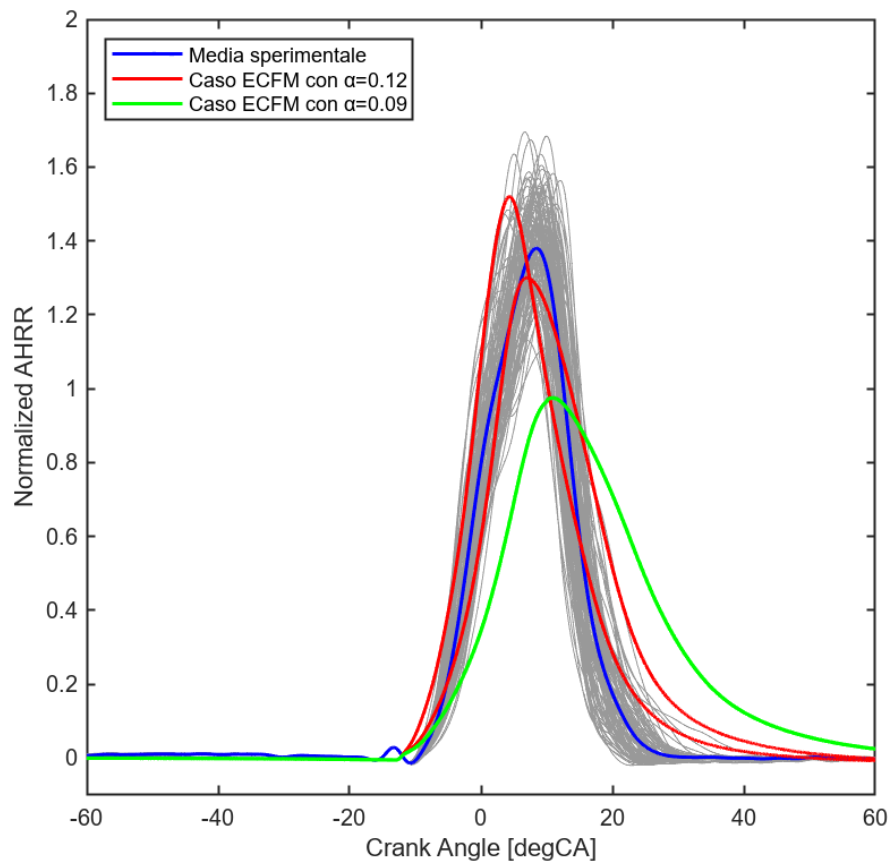


Figura 38, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=60\%$, $\Phi = 1$

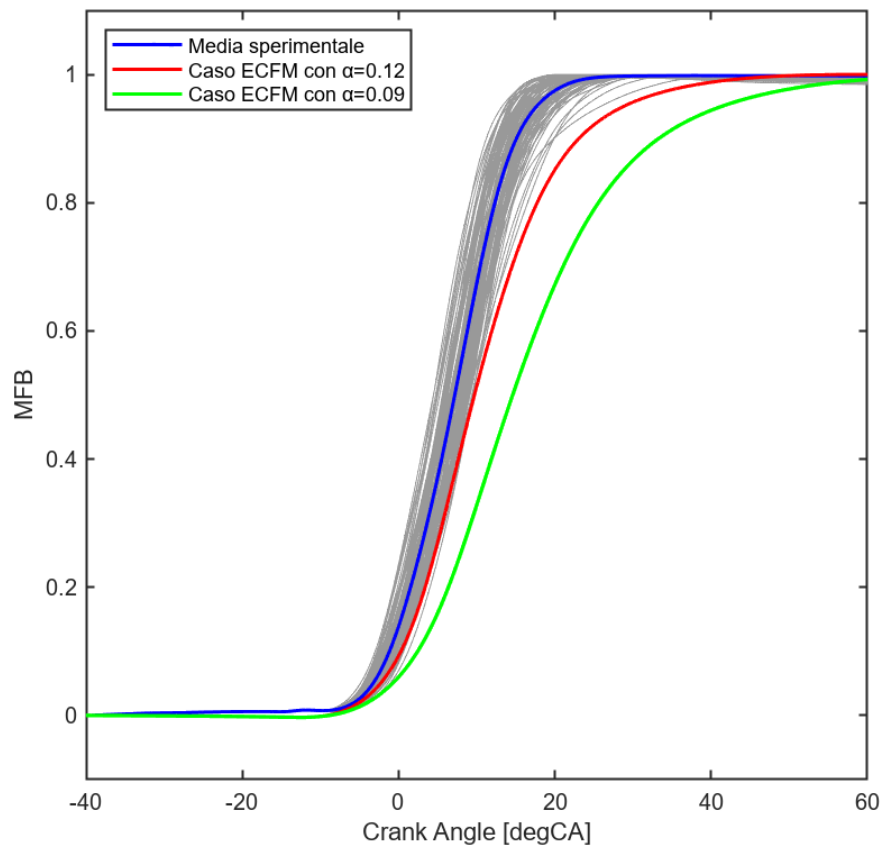


Figura 39, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=60\%$, $\Phi = 1$

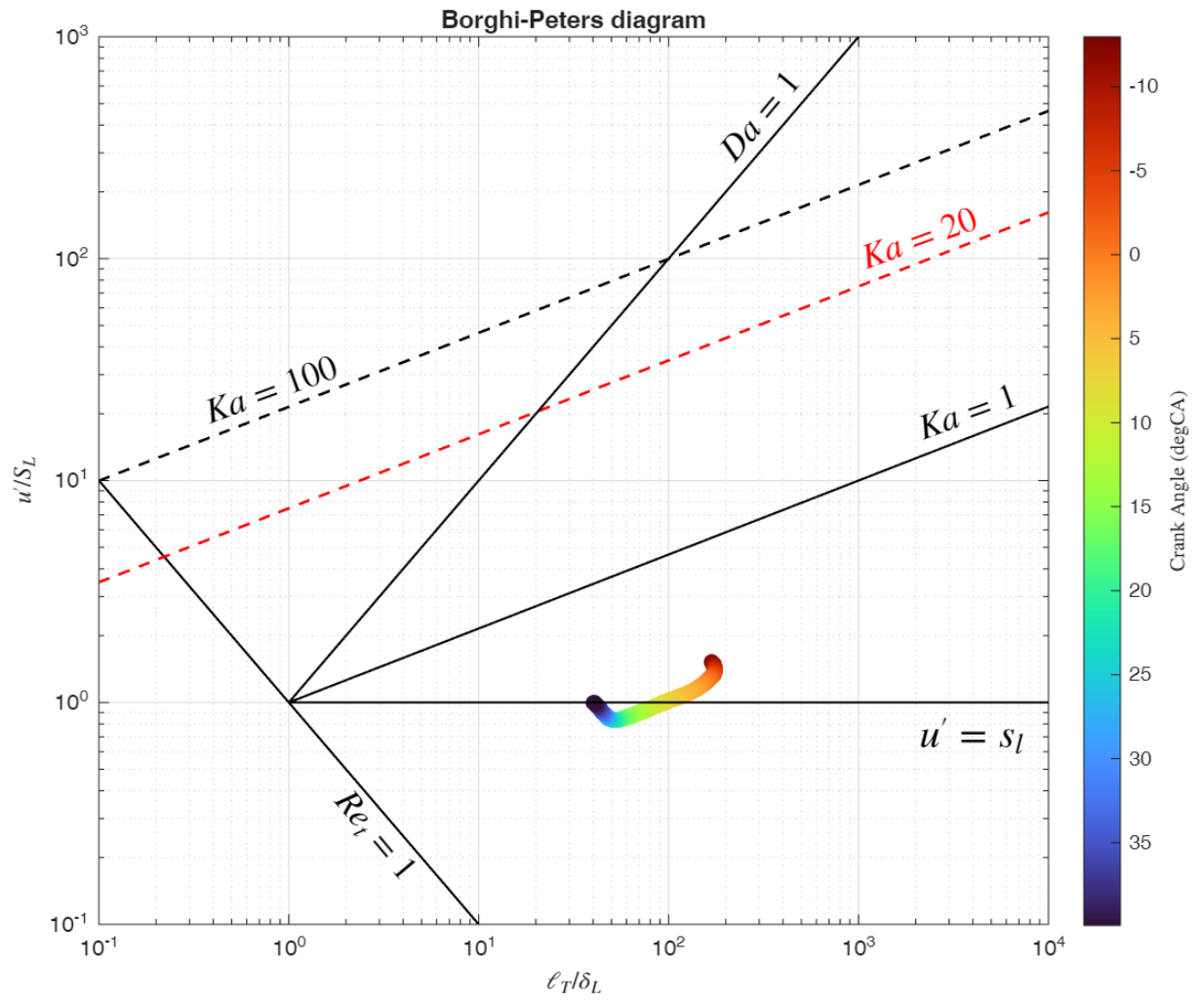


Figura 40, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=60\%$, $\Phi = 1$

6.2 Simulazioni con $\Phi = 0.8$

6.2.1 Caso 122 – Miscela con 5% di H_2

- Percentuale di idrogeno in volume: 5%
- Spark Timing: -55° CA
- IMEP: 7.2 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.04

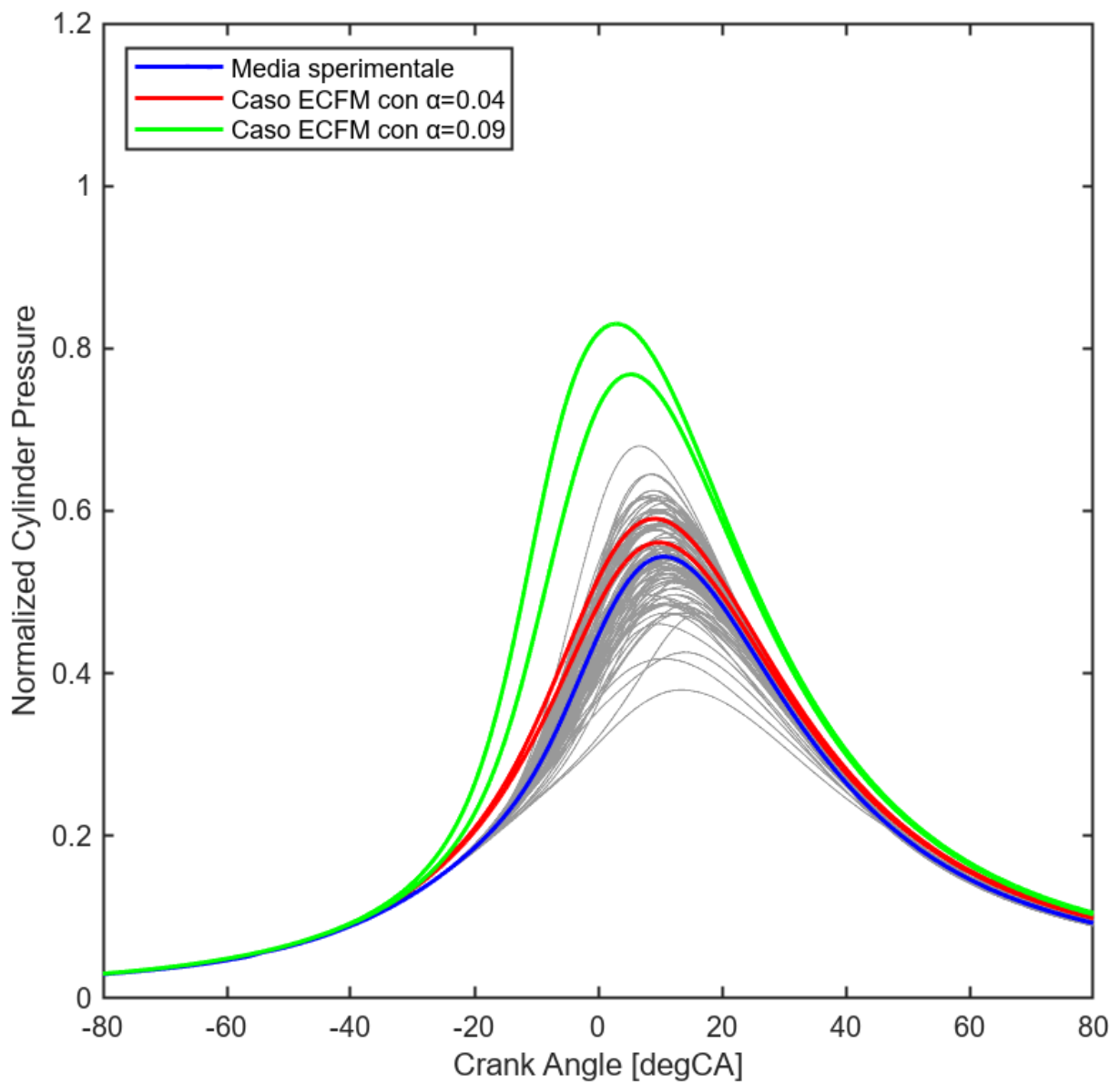


Figura 41, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 0.8$

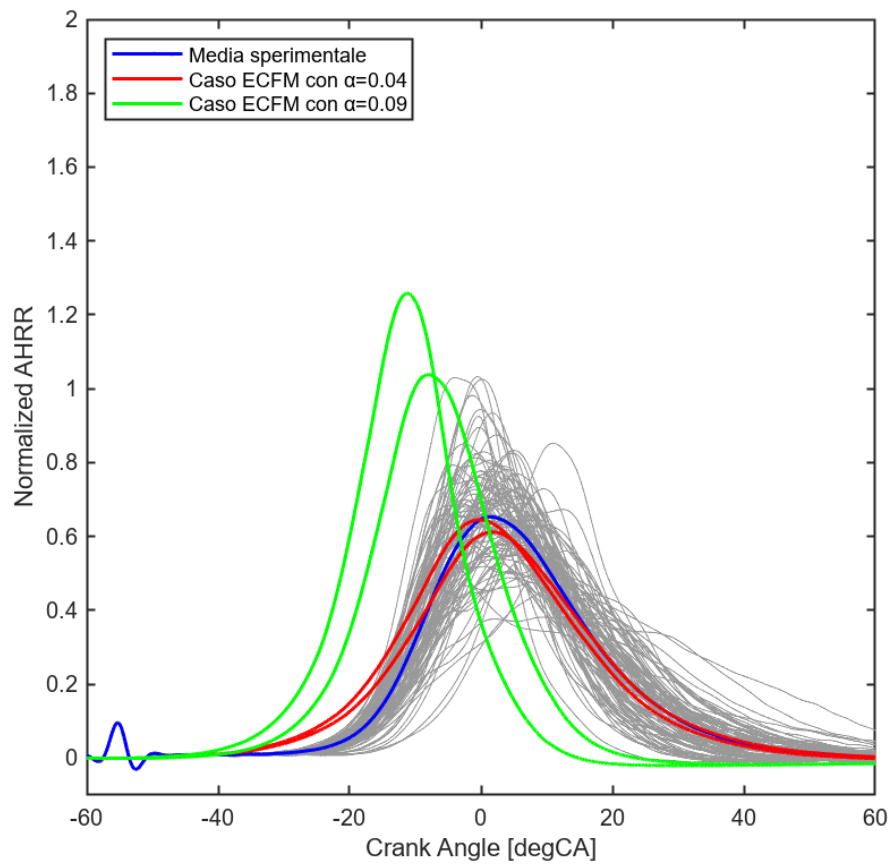


Figura 42, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 0.8$

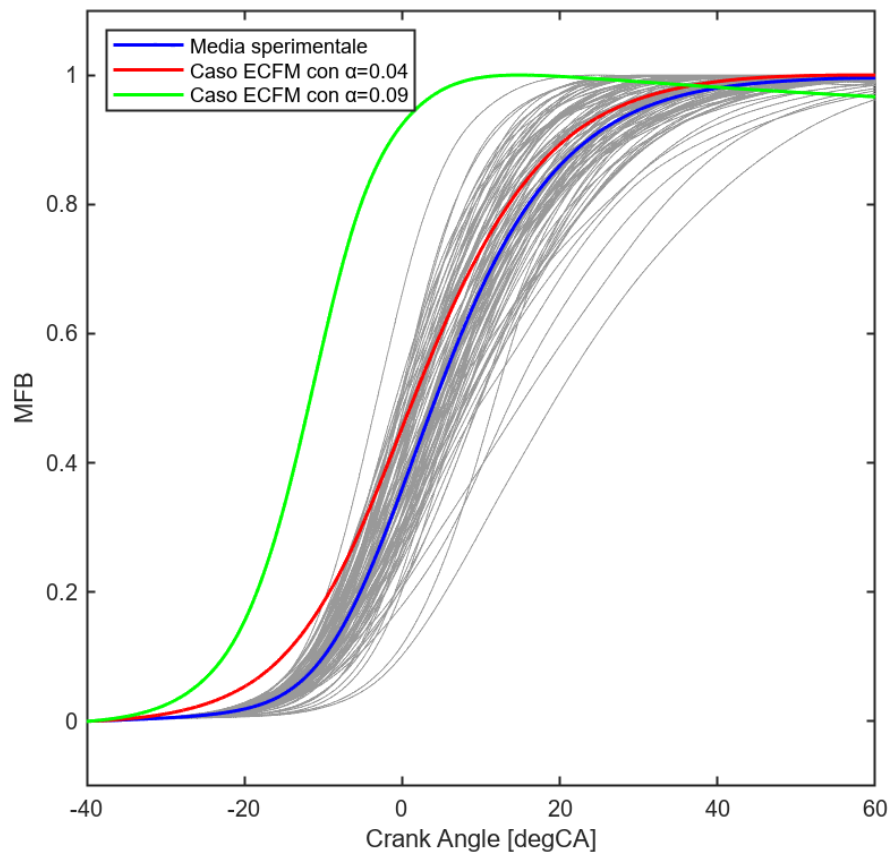


Figura 43, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 0.8$

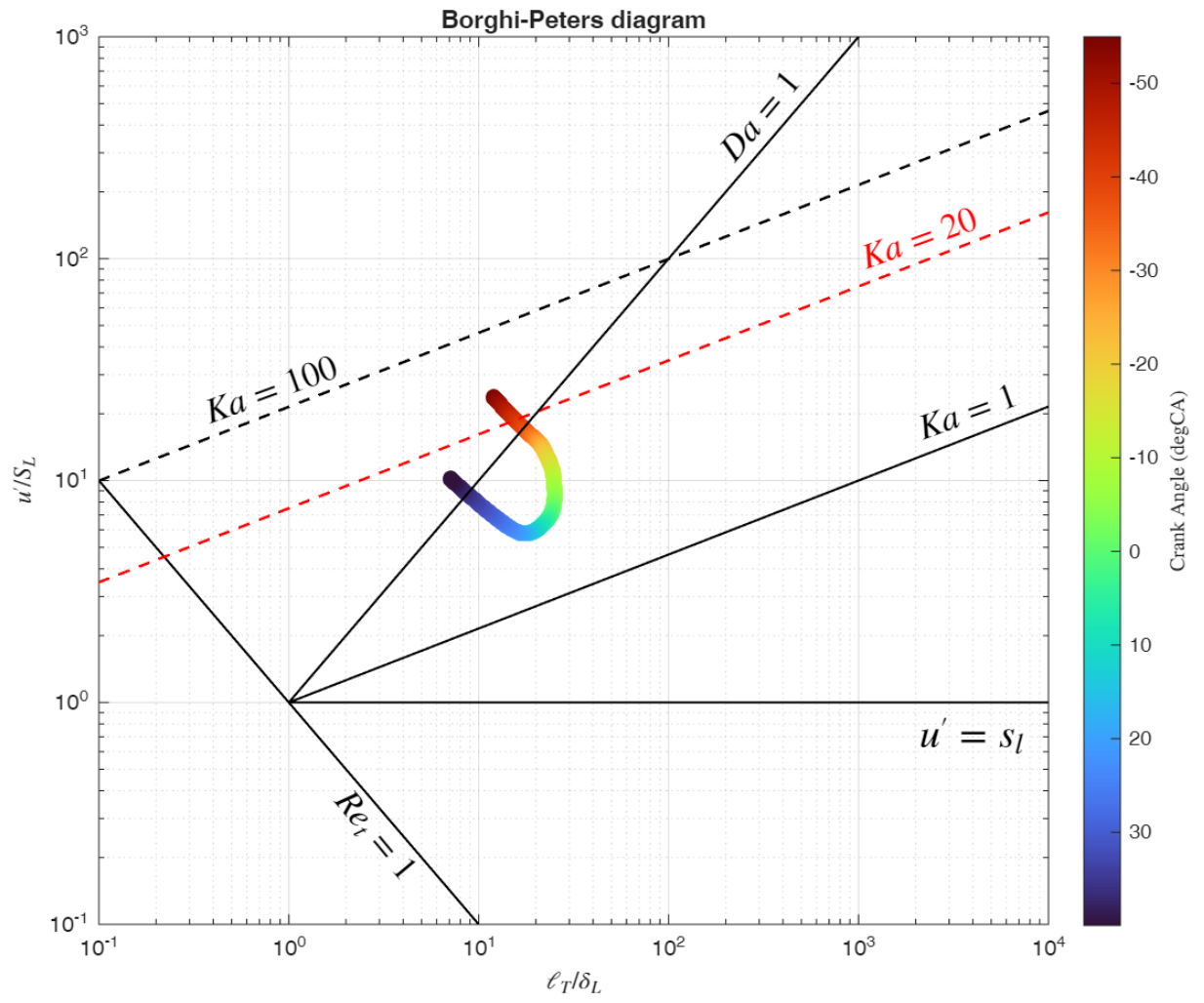


Figura 44, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=5\%$, $\Phi = 0.8$

6.2.2 Caso 129 – Miscela con 10% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 10%
- Spark Timing: -42° CA
- IMEP: 7.4 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.07

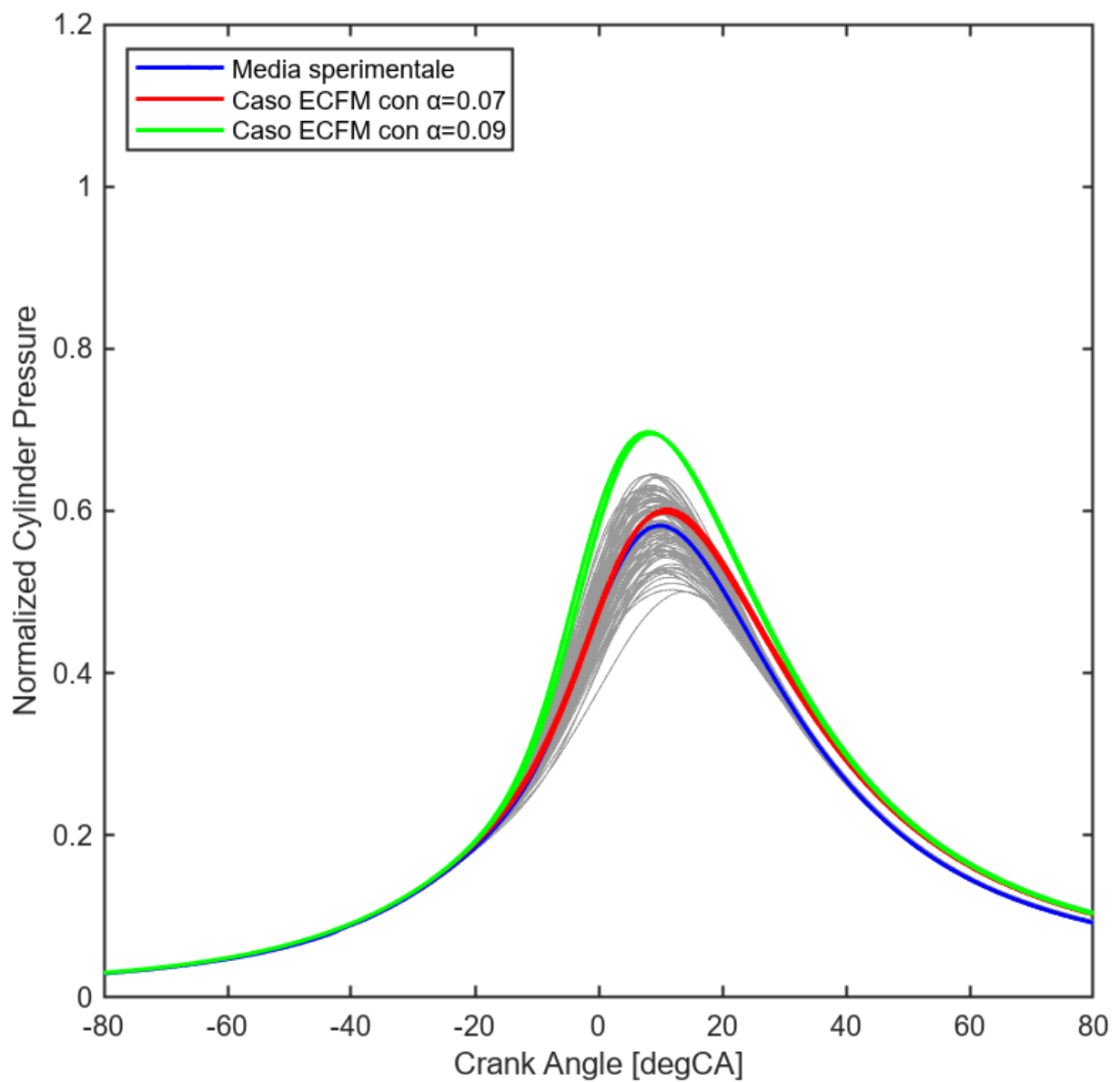


Figura 45, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=10%, $\Phi = 0.8$

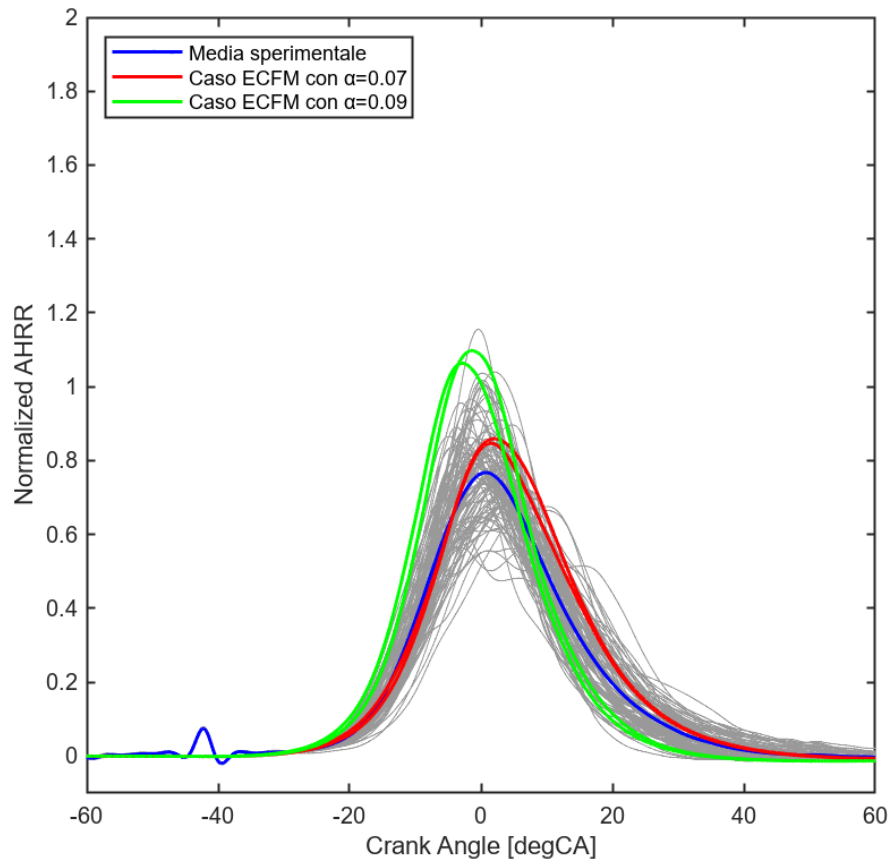


Figura 46, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=10\%$, $\Phi = 0.8$

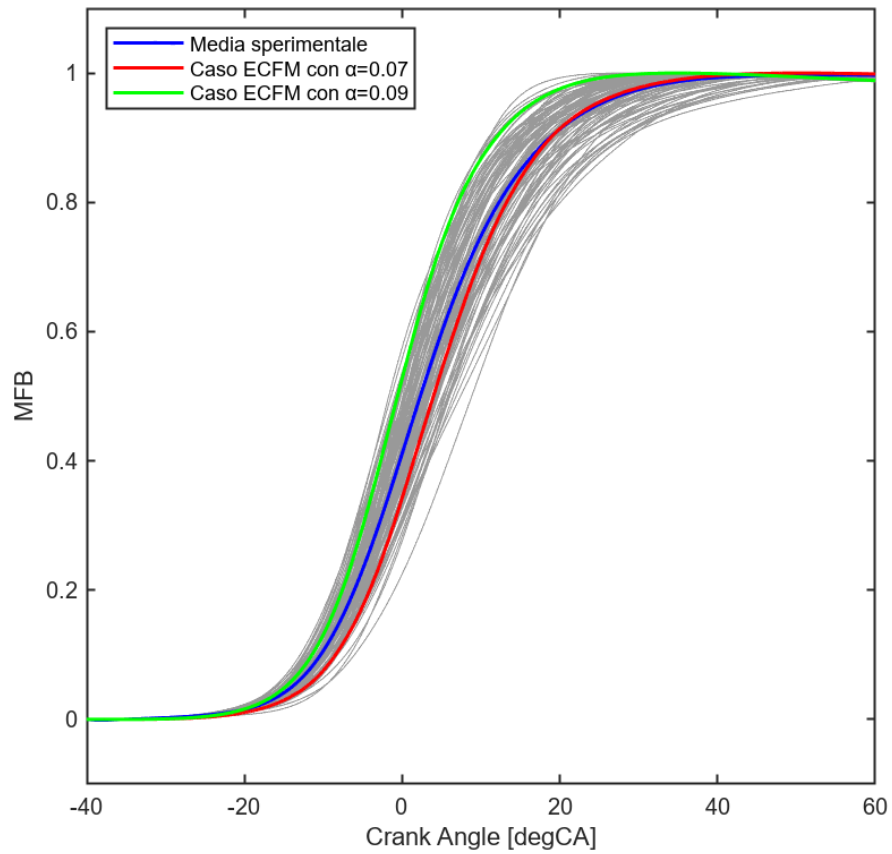


Figura 47, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=10\%$, $\Phi = 0.8$

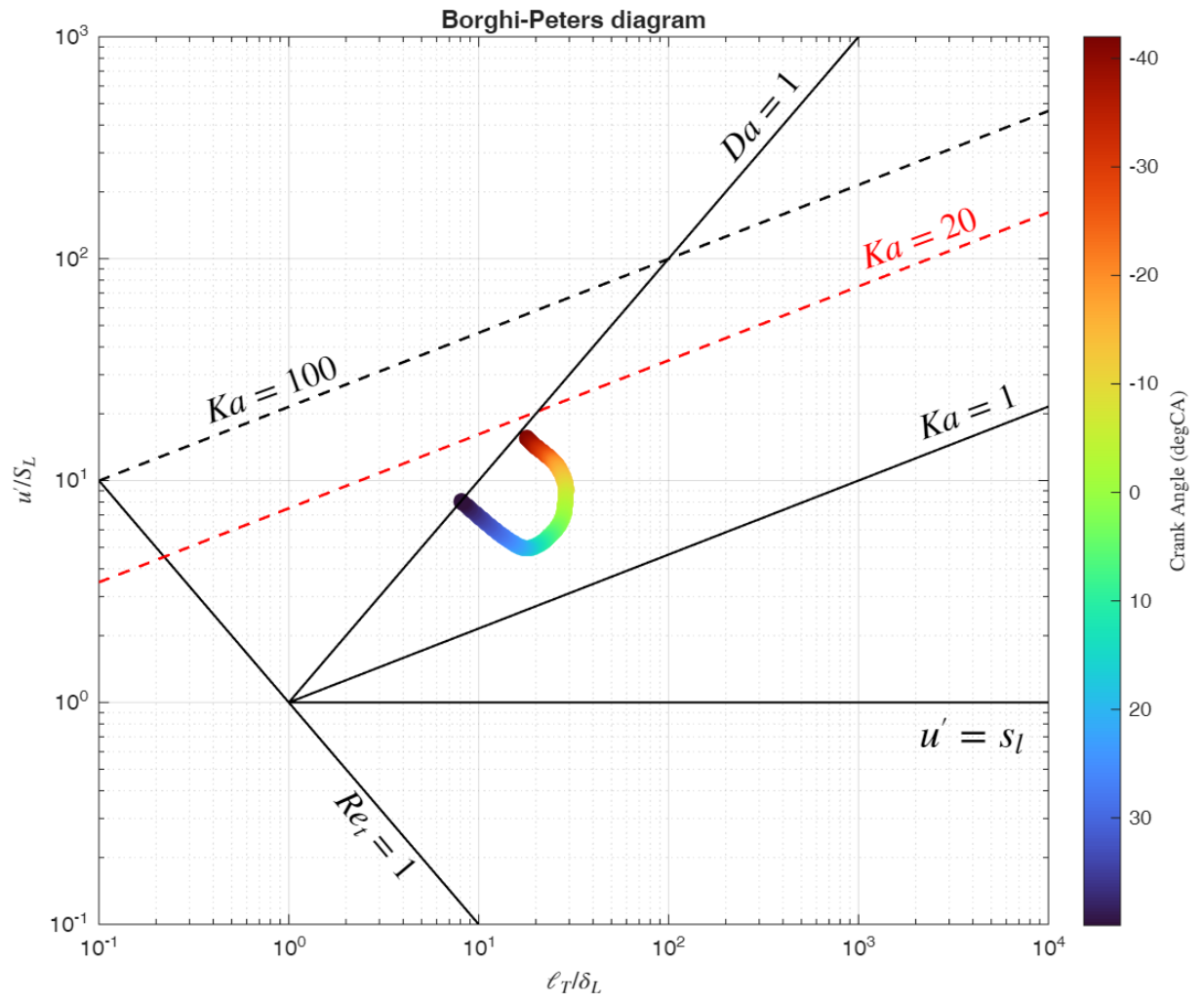


Figura 48, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=10\%$, $\Phi = 0.8$

6.2.3 Caso 136 – Miscela con 20% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 20%
- Spark Timing: -30° CA
- IMEP: 7.5 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.08

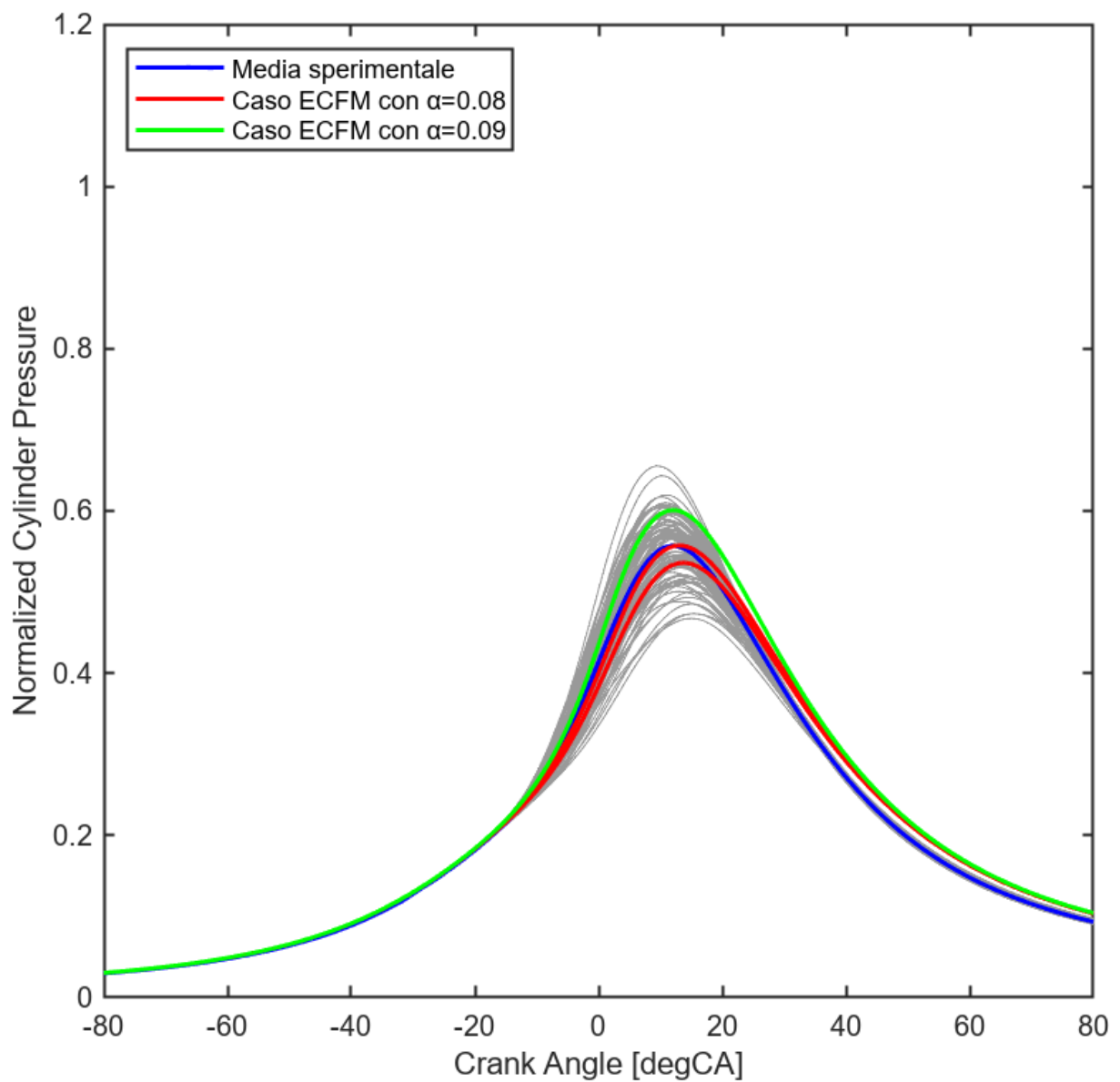


Figura 49, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=20%, $\Phi = 0.8$

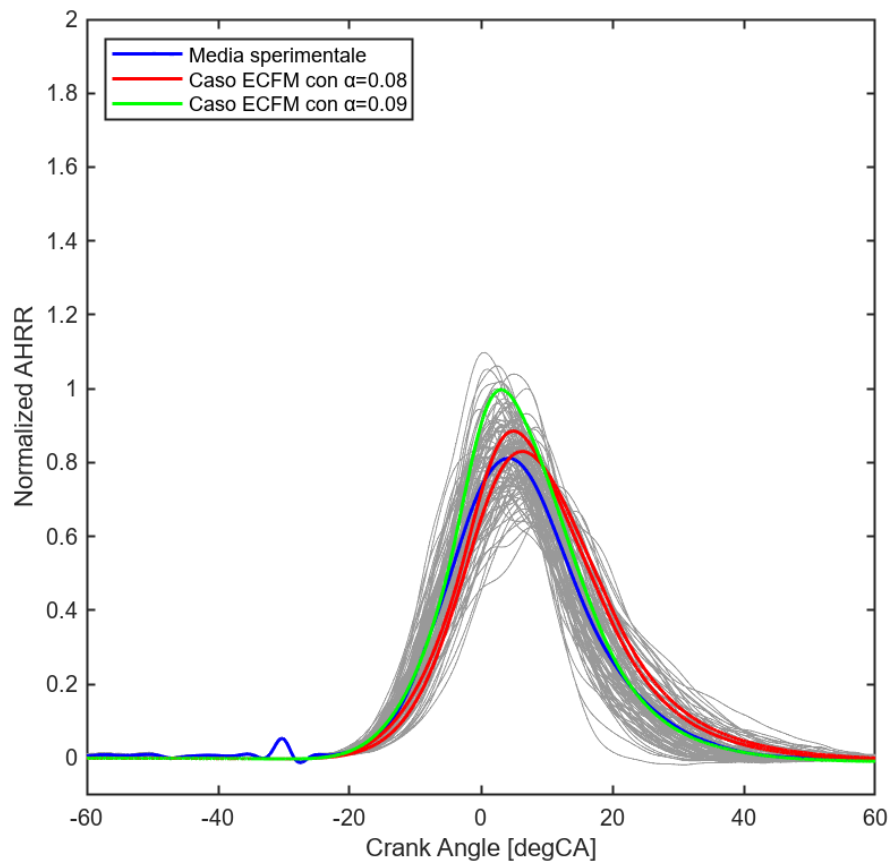


Figura 50, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=20\%$, $\Phi = 0.8$

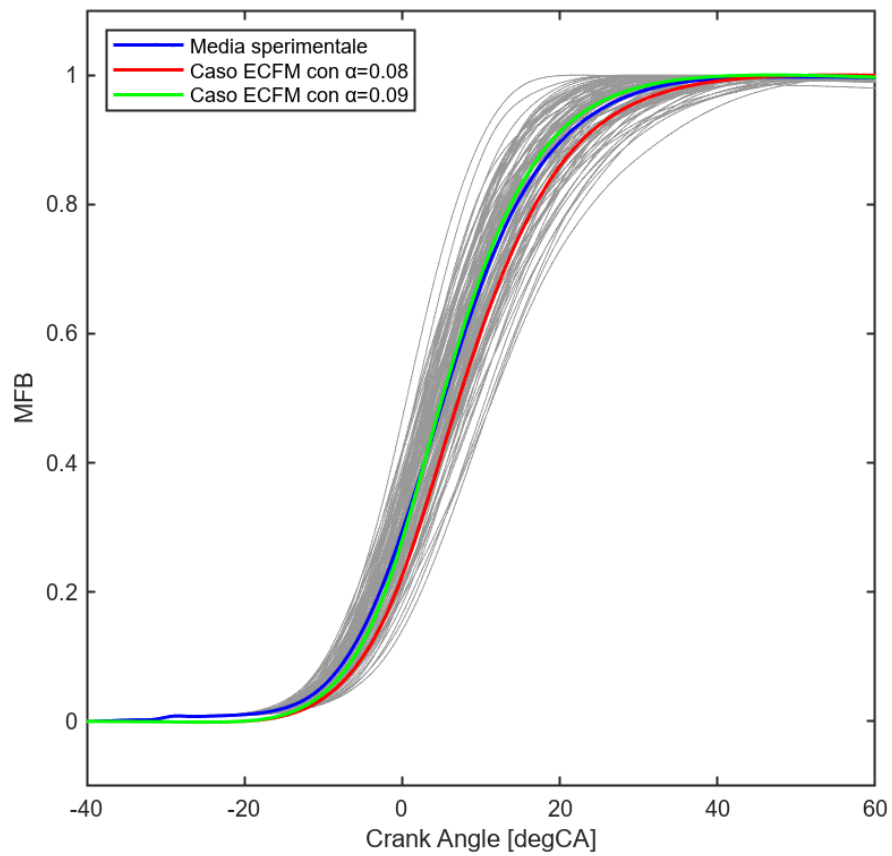


Figura 51, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=20\%$, $\Phi = 0.8$

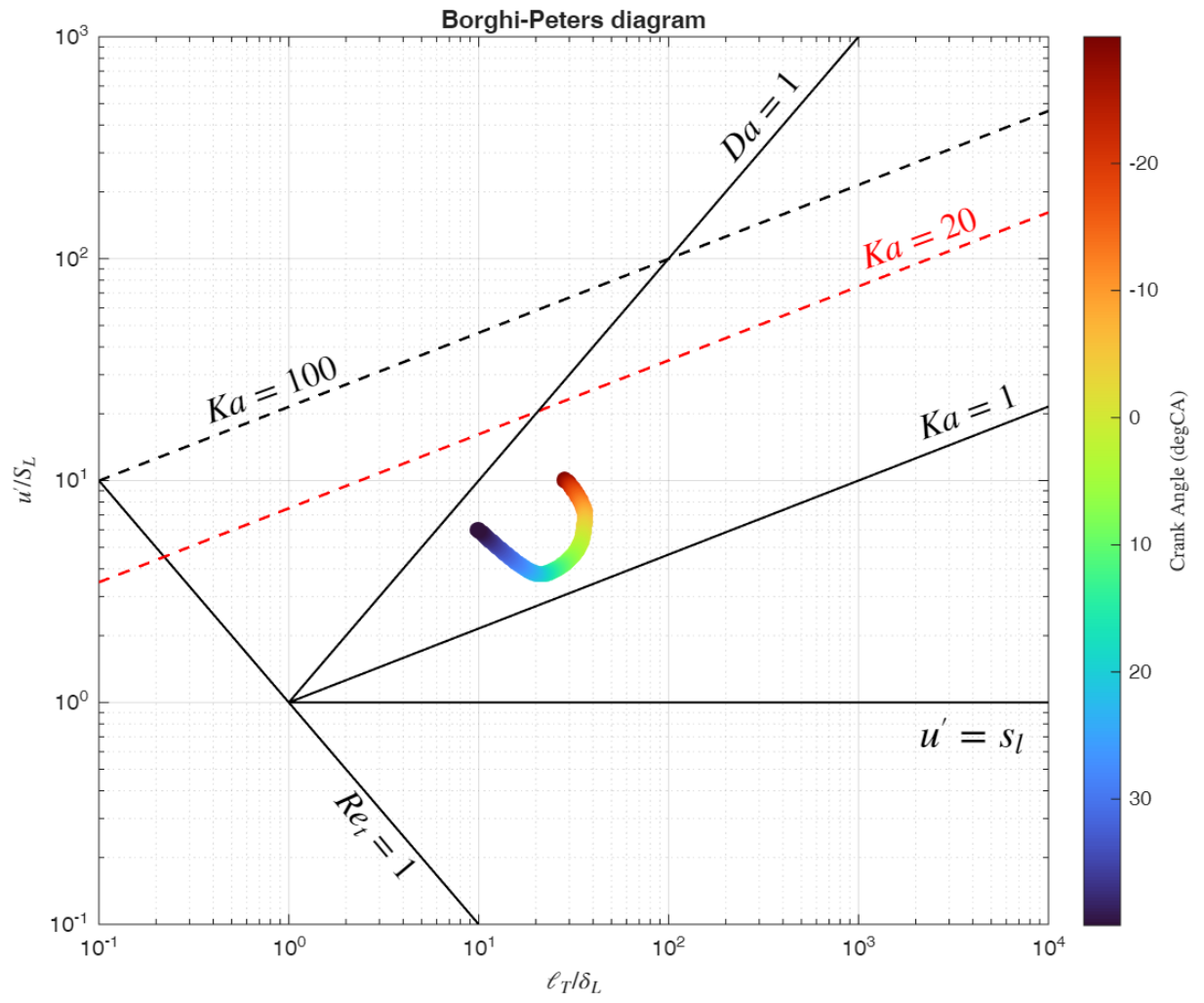


Figura 52, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=20\%$, $\Phi = 0.8$

6.2.4 Caso 143 – Miscela con 40% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 40%
- Spark Timing: -20° CA
- IMEP: 7.3 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.10

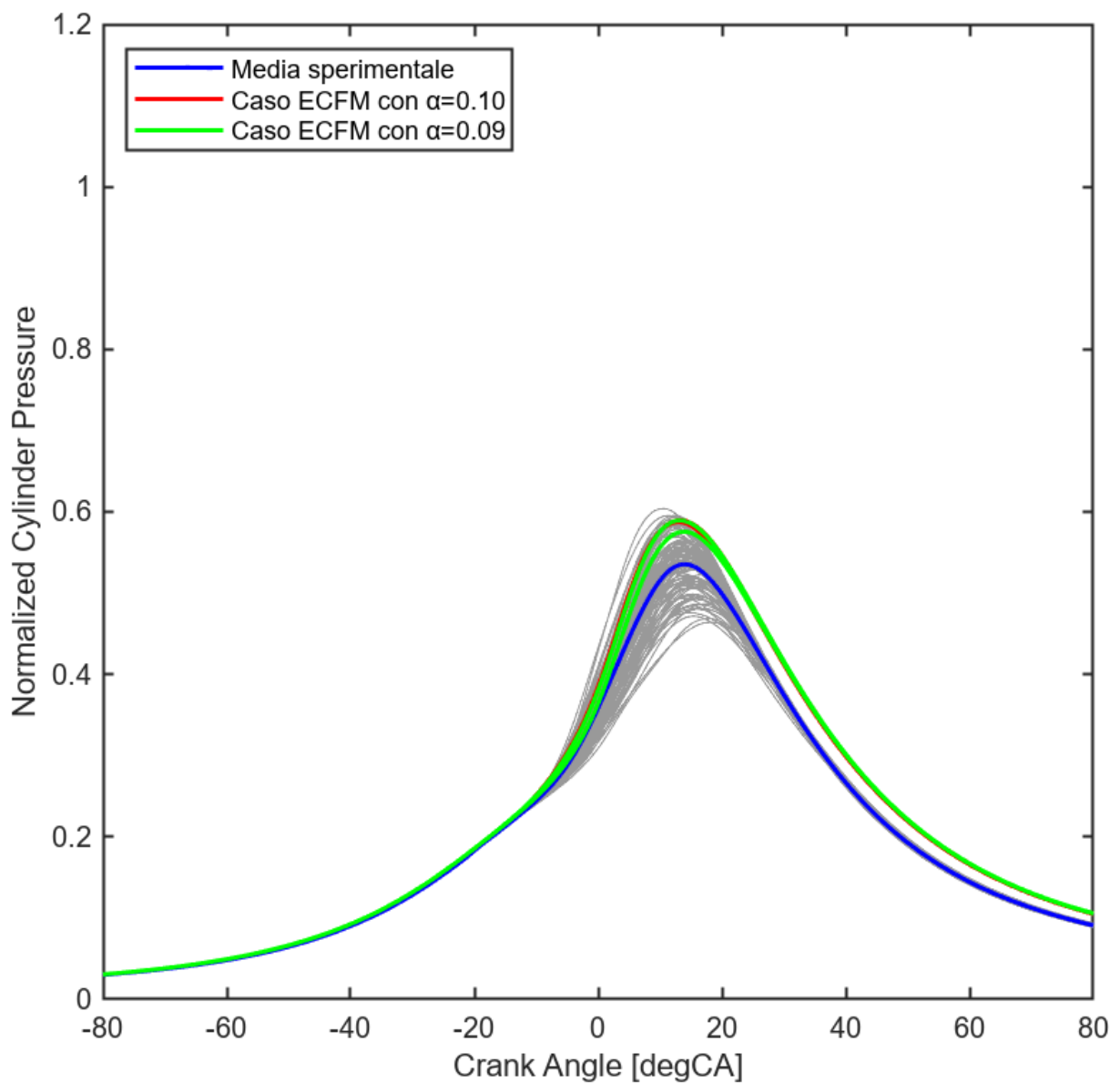


Figura 53, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=40%, $\Phi = 0.8$

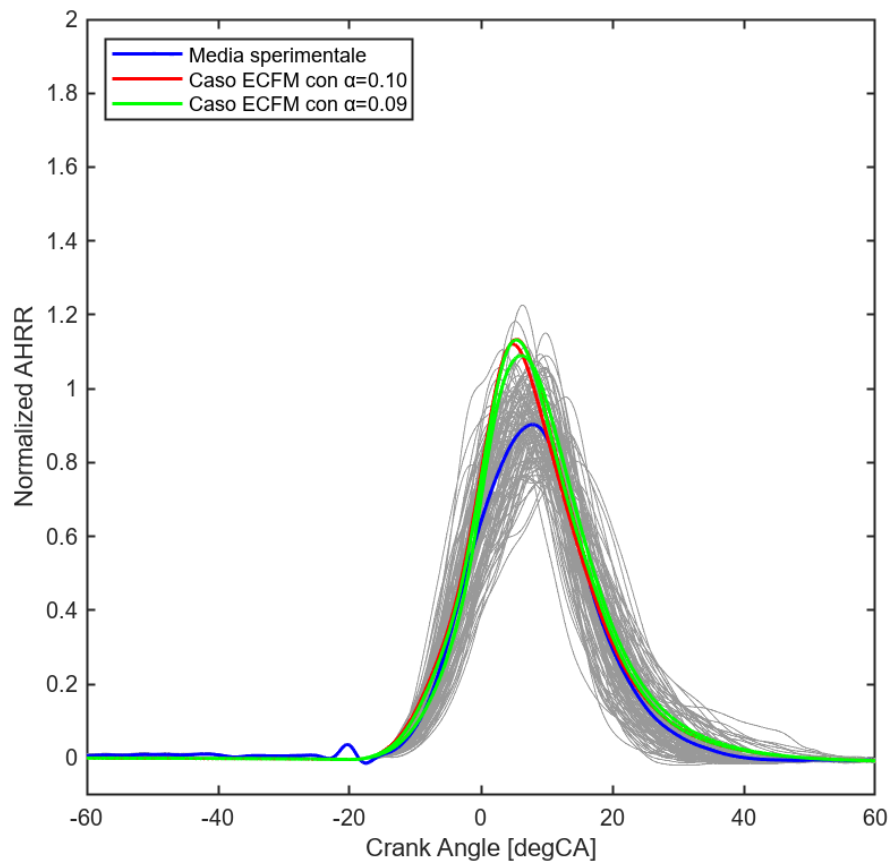


Figura 54, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=40\%$, $\Phi = 0.8$

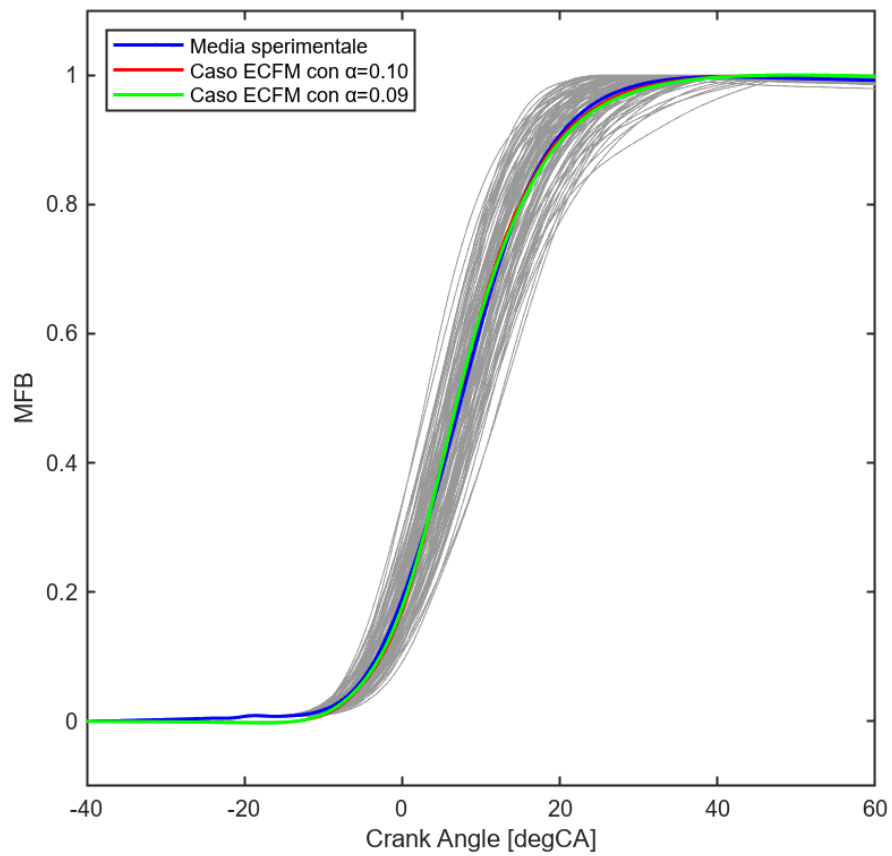


Figura 55, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=40\%$, $\Phi = 0.8$

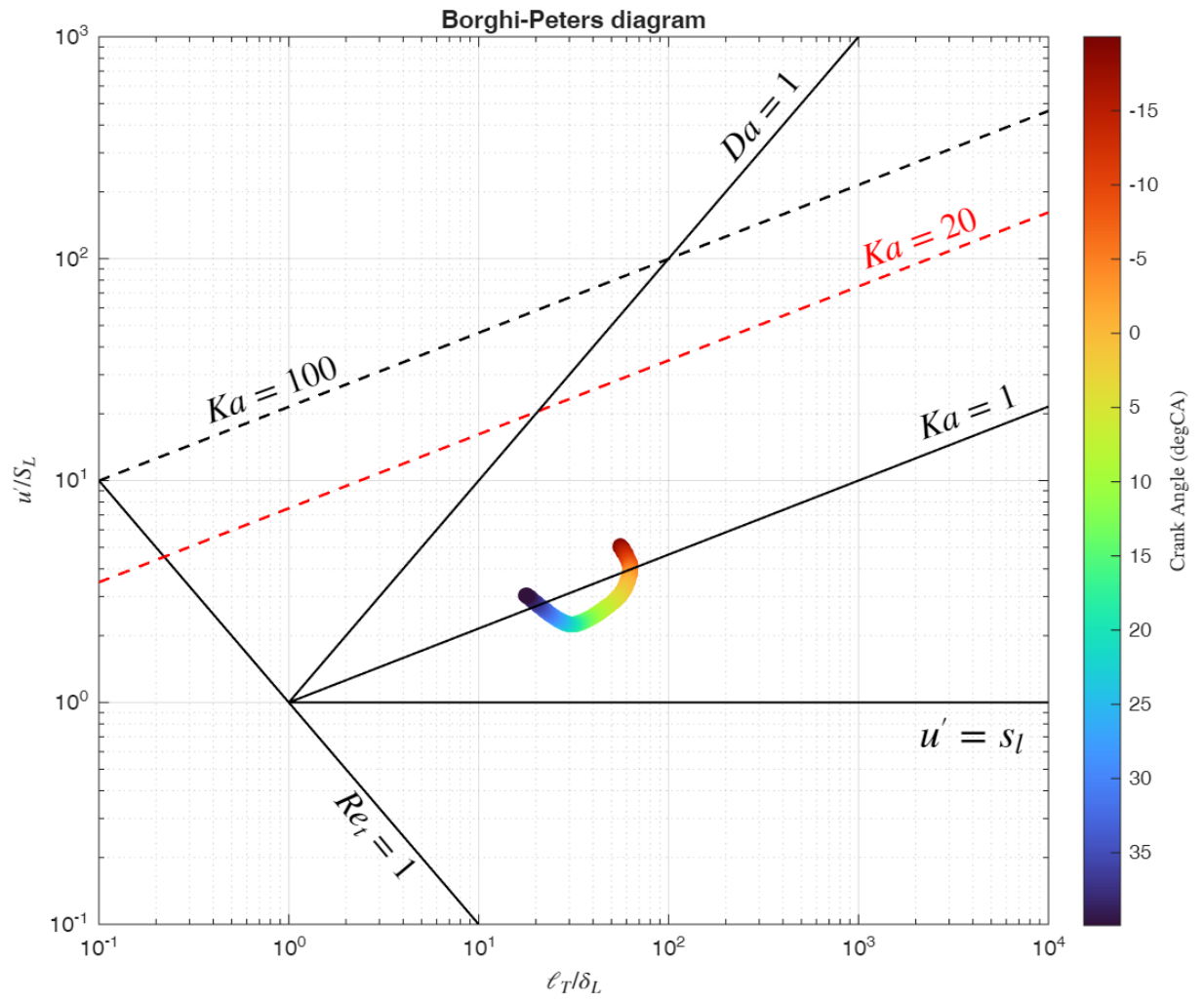


Figura 56, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=40\%$, $\Phi = 0.8$

6.2.5 Caso 150 – Miscela con 60% di H₂

- Percentuale di idrogeno in volume: 60%
- Spark Timing: -16° CA
- IMEP: 7.3 bar
- α_{stretch} calibrato: 0.11

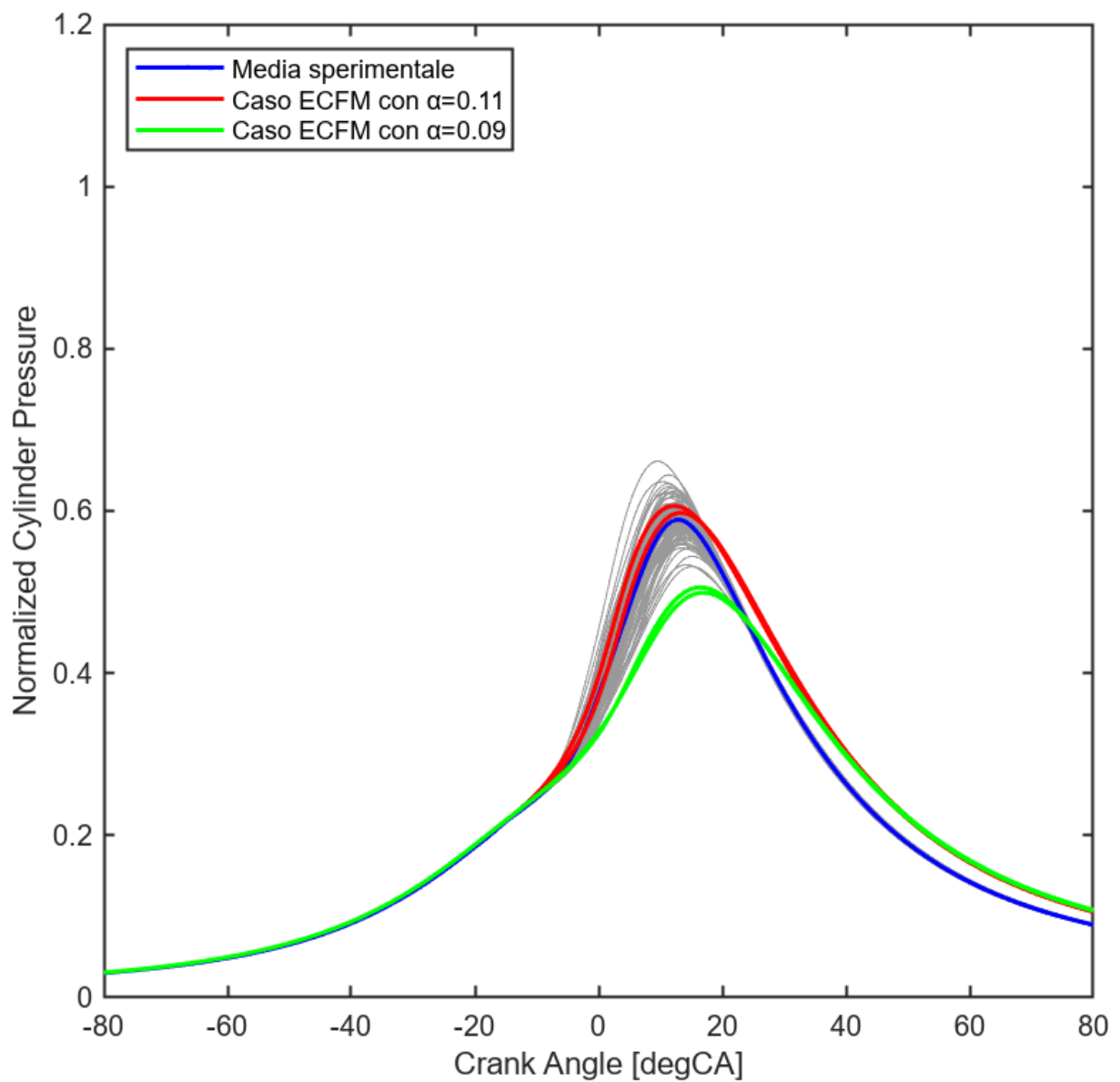


Figura 57, andamento di pressione all'interno del cilindro, Caso con %H₂=60%, $\Phi = 0.8$

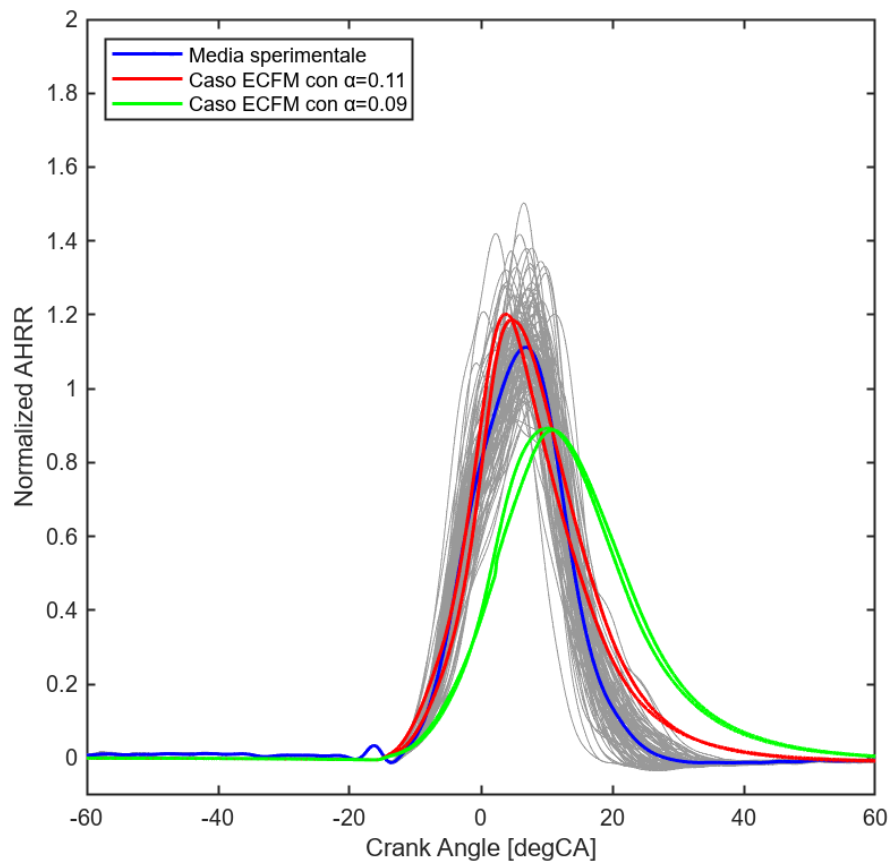


Figura 58, andamento Apparent Heat Release Rate, Caso con $\%H_2=60\%$, $\Phi = 0.8$

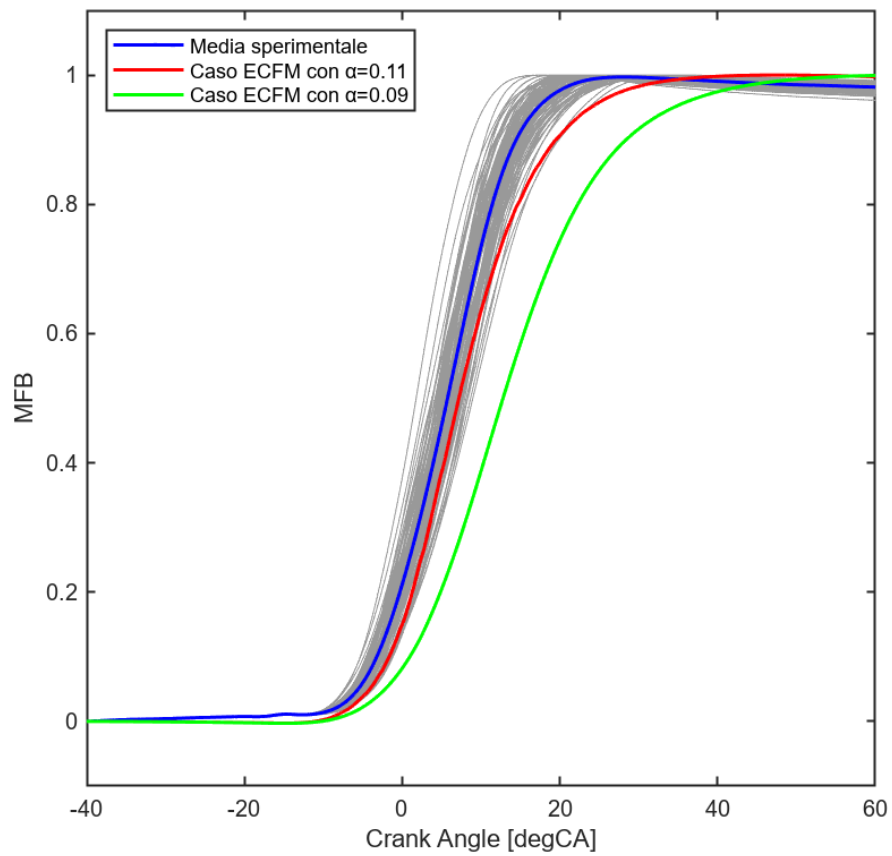


Figura 59, andamento Mass Fraction Burned, Caso con $\%H_2=60\%$, $\Phi = 0.8$

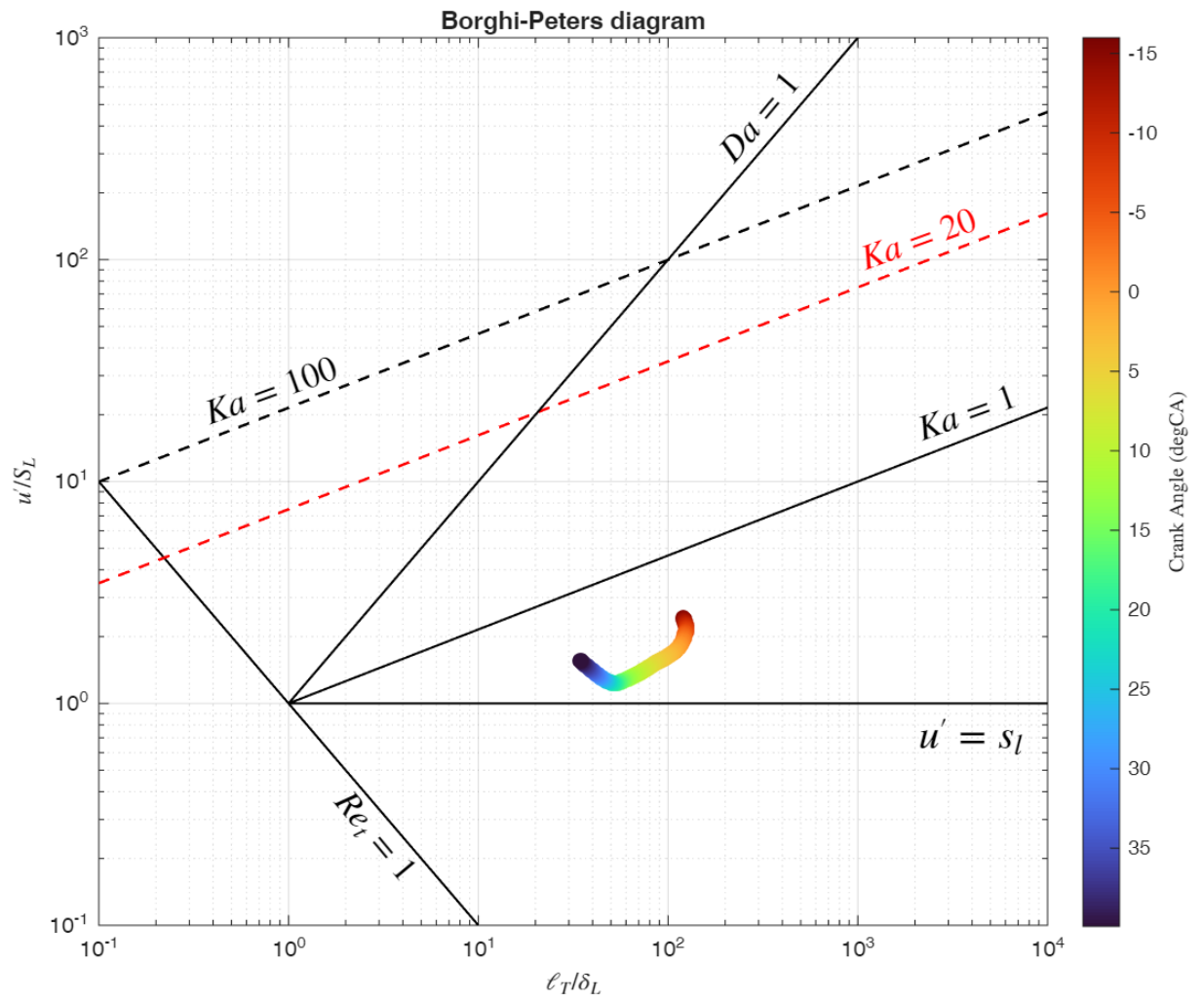


Figura 60, diagramma di Borghi-Peters, Caso con $\%H_2=60\%$, $\Phi = 0.8$

6.3 Discussione risultati

Dopo aver presentato in dettaglio l'insieme dei risultati numerici ottenuti dalle simulazioni CFD e dal successivo post-processing, è ora possibile sviluppare una discussione volta a mettere in relazione i diversi parametri analizzati. La *Figura 61* riassume i risultati della calibrazione del parametro $\alpha_{stretch}$, mostrando la sua variazione con la percentuale di idrogeno per due valori del rapporto di equivalenza a 1.2 bar all'aspirazione. I punti riportati derivano dalle simulazioni condotte, descritte in dettaglio nei precedenti paragrafi.

Per entrambe le condizioni di rapporto di equivalenza, il valore di $\alpha_{stretch}$ aumenta progressivamente con l'incremento della frazione di idrogeno. Nel caso stechiometrico, il parametro cresce da un valore iniziale di 0.03 per la miscela priva di idrogeno fino a 0.12 per la miscela con il 60% di idrogeno in volume. In condizioni magre ($\Phi = 0.8$), si osserva un andamento analogo, con valori leggermente inferiori rispetto al caso stechiometrico, $\alpha_{stretch}$ passa da circa 0.04 per il 5% di idrogeno fino a 0.11 per il 60%. L'incremento risulta quasi lineare oltre il 10% di idrogeno per entrambi i casi, mentre per basse percentuali di idrogeno (fino al 10%) si nota una variazione più rapida e irregolare del parametro. Si osserva inoltre che, fino al 40% di idrogeno, la miscela magra presenta valori di $\alpha_{stretch}$ leggermente superiori rispetto a quelli della miscela stechiometrica, oltre tale soglia, invece, la tendenza si inverte.

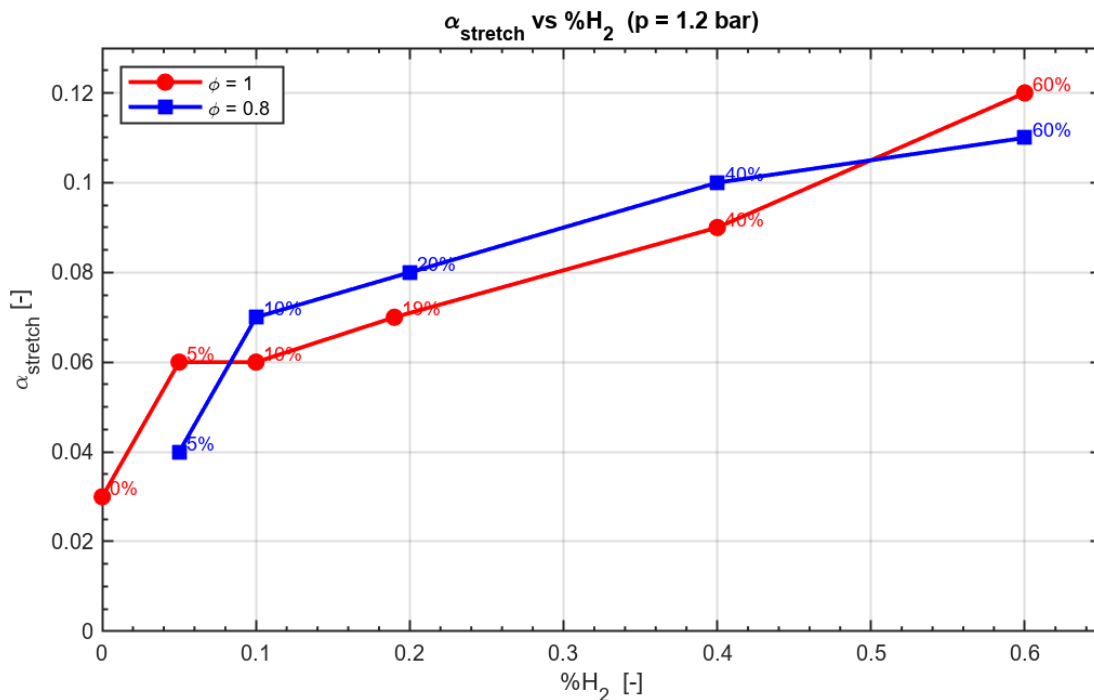


Figura 61, variazione del parametro di calibrazione $\alpha_{stretch}$ in funzione della percentuale di idrogeno a $\Phi=1$ e $\Phi=0.8$

Il confronto tra i profili di pressione in camera normalizzati ottenuti dalle simulazioni CFD e quelli rilevati sperimentalmente per le due condizioni di rapporto di equivalenza considerate, rispettivamente $\Phi = 1$ e $\Phi = 0.8$ (*Figura 62* e *Figura 63*) mostra un buon accordo per tutte le miscele analizzate, con il picco di pressione che si colloca in un intervallo di angolo di manovella pressoché costante, in quanto lo *spark advance* è stato variato da miscela a miscela con l'obiettivo di mantenere il ciclo vicino alle condizioni di MBT.

Per entrambe le condizioni si osserva un buon accordo tra i risultati numerici e sperimentali lungo l'intero intervallo di angolo di manovella, con la fase di incremento di pressione e la posizione del picco ben riprodotte dal modello. Al crescere della percentuale di idrogeno, la fase di incremento di pressione tende ad anticipare leggermente, comportamento coerente tra dati sperimentali e simulazioni. Le differenze più evidenti si riscontrano in corrispondenza del picco di pressione, dove il valore numerico risulta talvolta leggermente inferiore rispetto a quello sperimentale; tali discrepanze rimangono comunque contenute e non alterano significativamente l'andamento complessivo del ciclo, confermando la coerenza globale del modello nella previsione della pressione in camera al variare della composizione della miscela.

Analizzando i singoli grafici di pressione in camera presentati nei precedenti paragrafi, si nota come la variabilità ciclica tenda a diminuire all'aumentare della percentuale di idrogeno, fenomeno giustificabile con la lenta cinetica chimica dell'ammoniaca. L'incremento di idrogeno porta infatti ad un aumento della velocità di fiamma laminare della miscela e a una riduzione dell'energia minima di accensione, rendendo la fiamma più reattiva all'interazione con la turbolenza ed i tempi chimici caratteristici più corti. Tali evidenze sono confermate anche da Klawitter et al. (2024) [13], i quali mostrano come sia sufficiente una percentuale di idrogeno pari al 10% per ottenere sensibili miglioramenti nella stabilità della combustione e nella riduzione della variabilità ciclo per ciclo, cifre in linea con i risultati qui presentati.

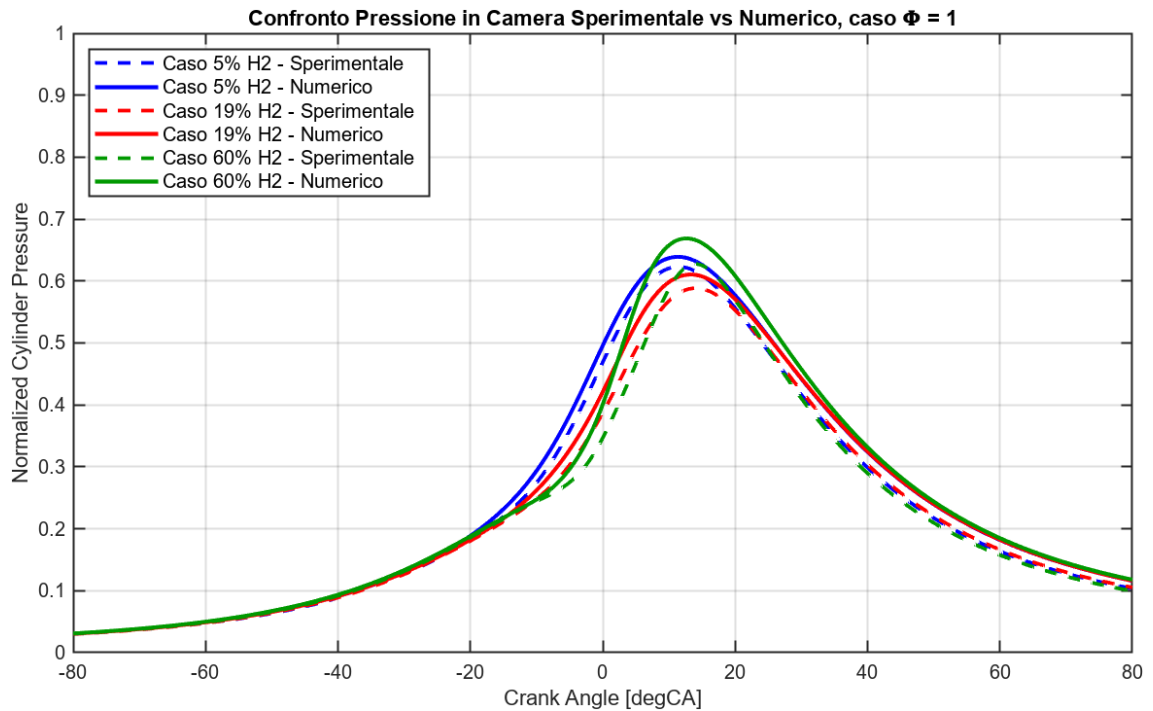


Figura 62, pressione in camera, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=1$

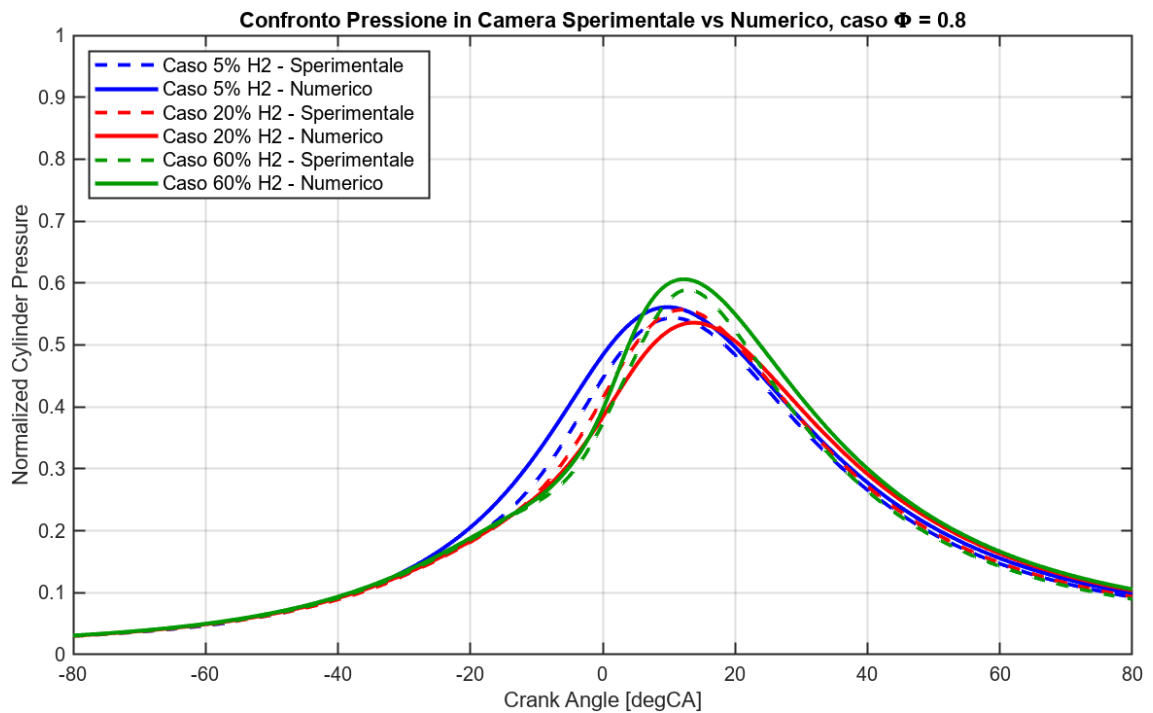


Figura 63, pressione in camera, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=0.8$

Dall'analisi dell'Apparent Heat Release Rate (AHRR), Figura 64 e Figura 65, emerge ancora più chiaramente l'effetto stabilizzante dell'idrogeno. Nel passaggio dal 5% al 60% si nota, infatti, come la curva si restringa, indicando una combustione più rapida con una energia rilasciata in meno gradi di manovella. Inoltre, il picco risulta essere sempre più elevato e maggiormente localizzato in prossimità del PMS. Dal punto di vista teorico, tali variazioni

riflettono principalmente l'influenza dell'aumento della velocità di fiamma e della diffusività della miscela poiché, all'aumentare dell'idrogeno, l'incremento della reattività del sistema favorisce un'accelerazione della fase di rilascio di calore, riducendo la durata complessiva.

Dal confronto tra i risultati sperimentali e numerici emerge che, nelle simulazioni, il picco di rilascio di calore risulta più alto e stretto, ad indicare una combustione maggiormente rapida e concentrata rispetto a quanto osservato sperimentalmente, dove invece l'andamento appare più smussato e distribuito. Le discrepanze più evidenti si riscontrano per la miscela con il 60% di idrogeno in condizioni stechiometriche, dove il modello tende a sovrastimare il picco di rilascio termico. Tale comportamento risulta coerente con quanto riportato in letteratura [14] poiché alle alte percentuali di idrogeno, le temperature di fiamma più elevate amplificano le perdite termiche alle pareti, effetto che nel modello numerico è rappresentato in forma semplificata. In condizioni leggermente magre, la discrepanza si riduce, in accordo con la diminuzione della temperatura media dei gas e quindi con la minore influenza dello scambio termico parete/gas. Dal confronto incrociato tra le due condizioni operative si rileva che la forma dell'andamento appare simile, sebbene con $\Phi = 0.8$ le differenze tra numerico e sperimentale tendano a ridursi. Nel complesso, l'andamento mostra come la calibrazione del parametro α_{stretch} permetta di ottenere un buon livello di coerenza tra risultati numerici e sperimentali anche per l'AHRR.

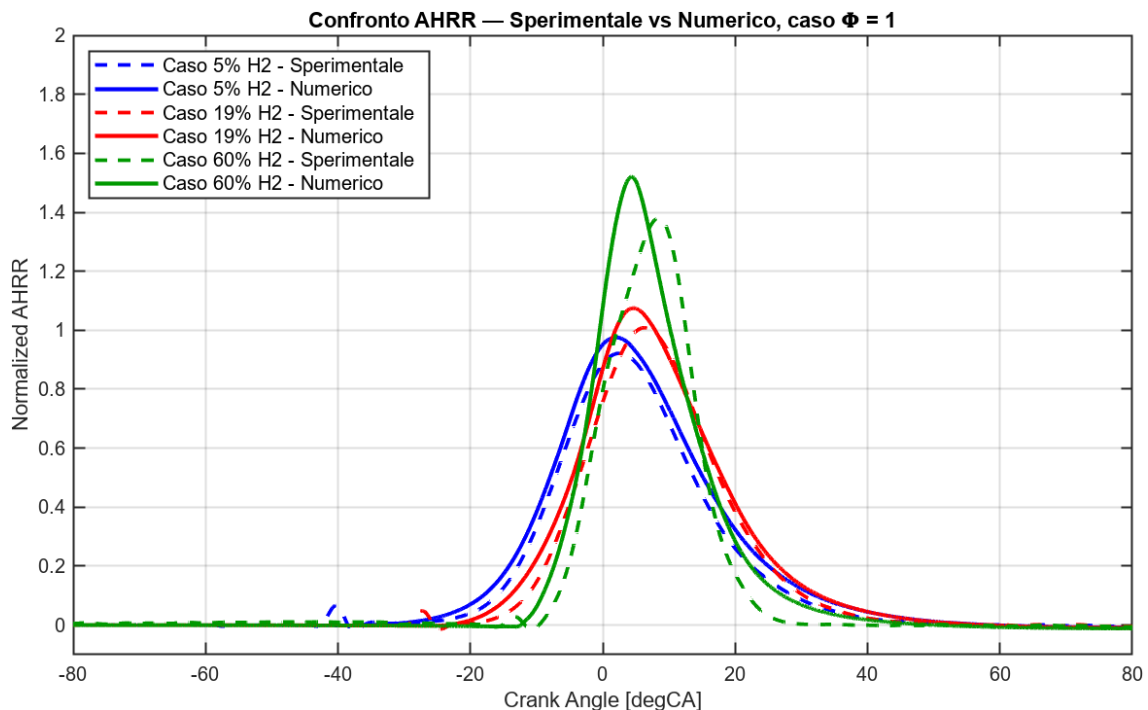


Figura 64, Apparent Heat Release Rate, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=1$

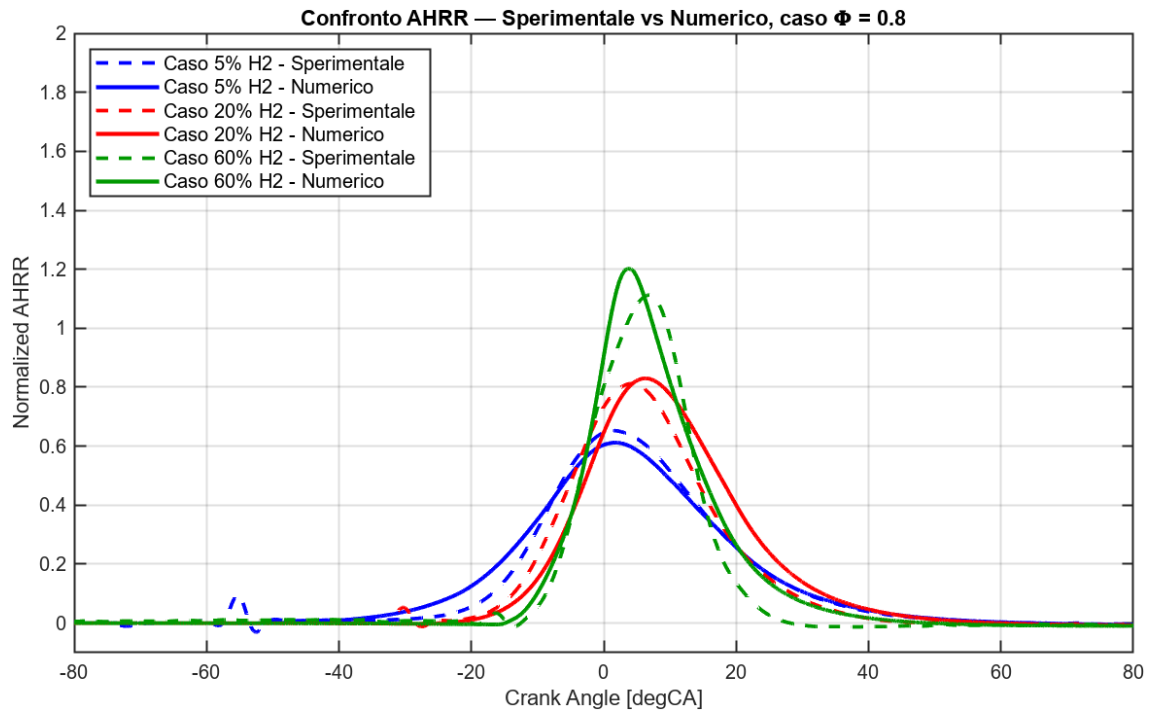


Figura 65, Apparent Heat Release Rate, confronto caso sperimentale e numerico per $\Phi=0.8$

Le differenze osservate al variare della percentuale di idrogeno sono confermate dalle mappe di combustione in camera, riportate in funzione della variabile di progresso e visualizzate, per ciascun punto operativo, ai medesimi valori di MFB mostrati in *Figura 66*. Il confronto tra simulazioni e dati sperimentali mostra che l'aumento della percentuale di idrogeno comporta un marcato anticipo della combustione, con una riduzione del ritardo tra l'accensione e le fasi iniziali della propagazione.

Nel caso della miscela con il 5% di idrogeno, la combustione risulta più lenta fin dalle prime fasi e si protrae fino al termine con un fronte più spesso e diffuso. In particolare, si osservano zone, soprattutto in prossimità delle pareti, in cui il fronte non riesce a propagarsi completamente, indice di un processo lento e distribuito. Al contrario, con il 60% di idrogeno il fronte di fiamma appare molto più sottile e compatto, con una propagazione rapida e uniforme all'interno della camera. La zona di reazione si estende più rapidamente verso il volume centrale della camera, raggiungendo il 90% di massa bruciata in anticipo rispetto alla miscela con il 5% di H_2 . Questo effetto si riflette in un'accelerazione del processo di rilascio di calore e in un anticipo del completamento della combustione, fenomeni entrambi catturati dal modello numerico.

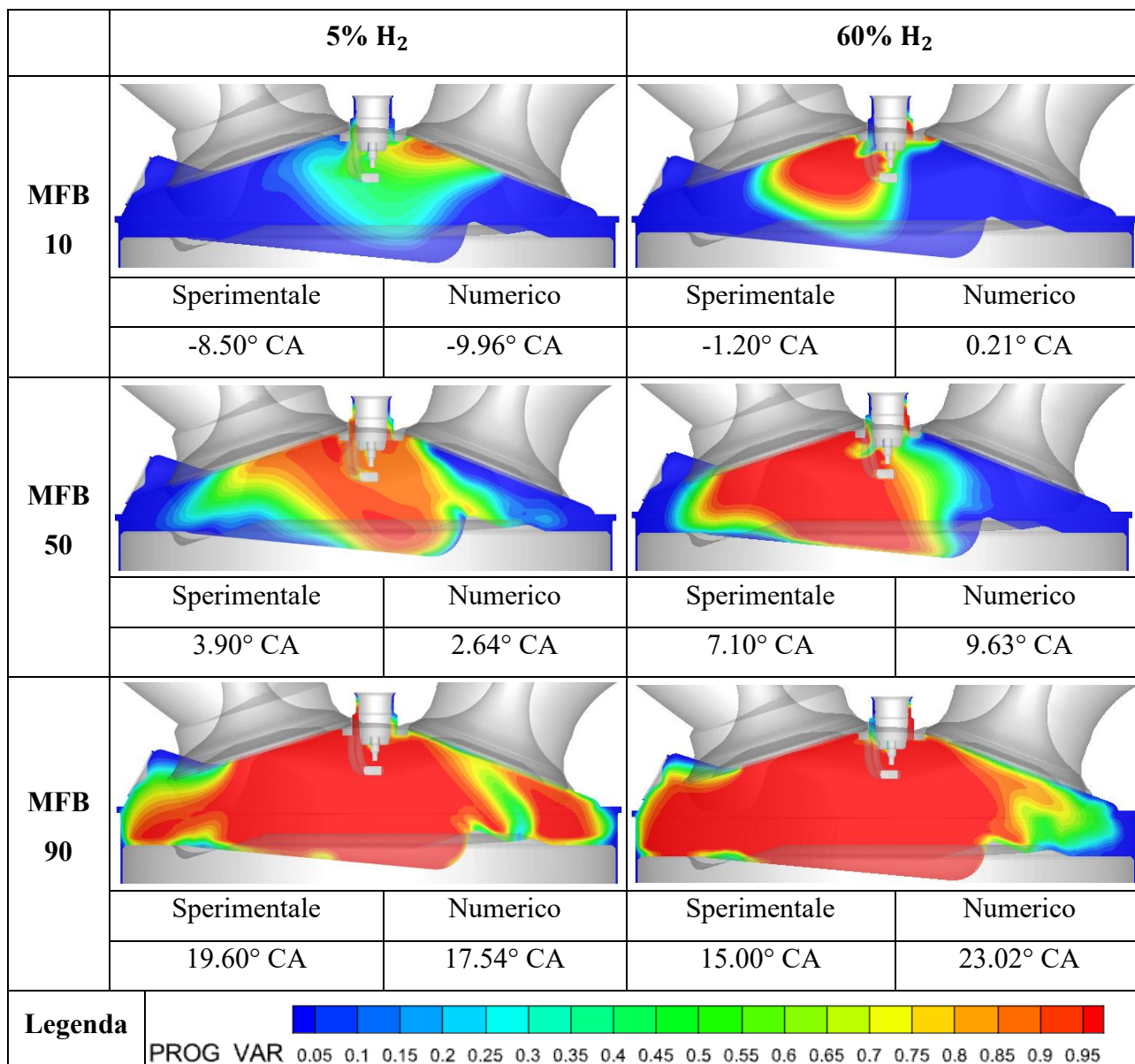


Figura 66, confronto tra risultati sperimentali e numerici ai diversi stadi di combustione (MFB10, MFB50, MFB90) per due percentuali di idrogeno (5% e 60%) a $\Phi=1$

Nel complesso, la correlazione tra simulazioni e risultati sperimentali è soddisfacente in entrambi i casi, con discrepanze maggiori nelle fasi finali della combustione. Questo conferma la capacità del modello numerico di catturare correttamente l'effetto della variazione di idrogeno sulla dinamica della combustione.

Tutto quanto esposto finora trova riscontro anche nel diagramma di Borghi–Peters (Figura 67 e Figura 68), che offre una lettura congiunta degli effetti di combustione e turbolenza. In ciascun grafico sono rappresentate le traiettorie corrispondenti alle miscele con differenti percentuali di idrogeno, calcolate sulla base dei risultati ottenuti.

I punti operativi a basso contenuto di idrogeno (0–20%) si collocano nell'area delle *thin reaction zones*, regime in cui la turbolenza penetra parzialmente nel fronte di fiamma ispessendolo, rendendolo più sensibile alle fluttuazioni e meno stabile, facendone derivare una propagazione meno compatta e più distribuita nel tempo.

All'aumentare della frazione di idrogeno (40–60%), i punti si spostano verso il dominio dei *corrugated flamelets* (con $Ka < 1$ e $Da \gg 1$). In questa zona la chimica è relativamente più rapida della turbolenza: i vortici non riescono a penetrare lo strato di reazione, che rimane sottile, assimilabile localmente a quello laminare, ma corrugato e allungato dal moto turbolento. In termini di coordinate del diagramma, la transizione si traduce in una traslazione verso destra, coerente con l' S_L in aumento e il δ_L in diminuzione al crescere della percentuale di idrogeno, e con gli AHRR più stretti e di picco più elevato osservati.

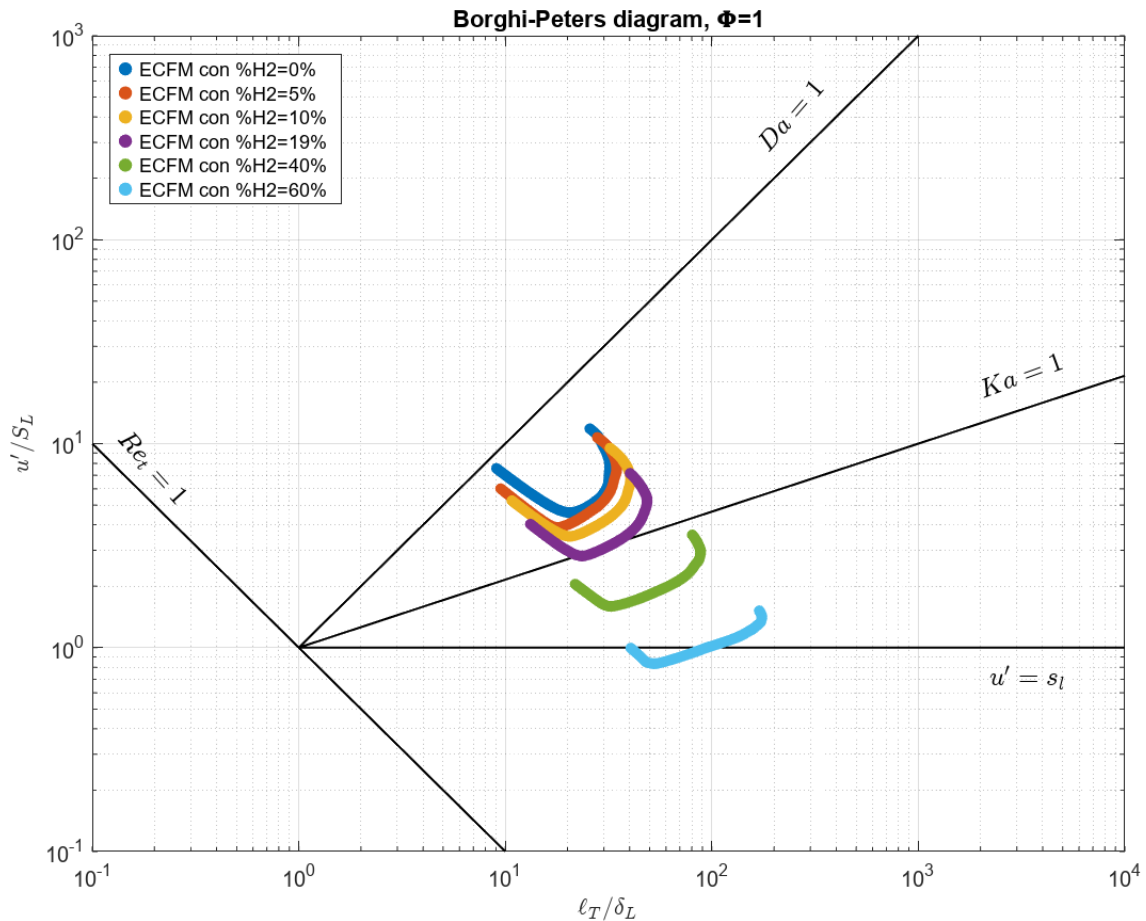


Figura 67, diagramma Borghi-Peters per punti operativi a $\Phi=1$

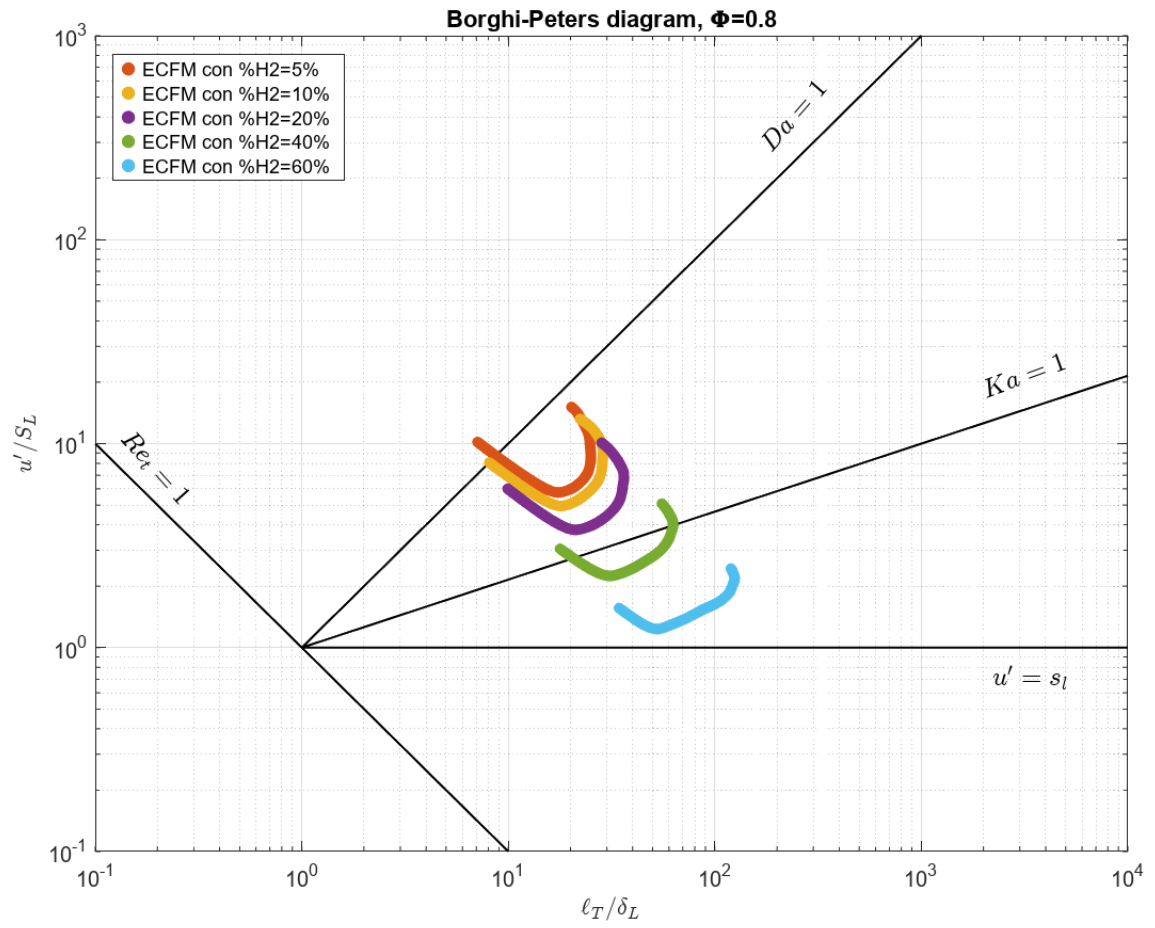


Figura 68, diagramma Borghi-Peters per punti operativi a $\Phi=0.8$

7 Conclusioni e sviluppi futuri

Il lavoro svolto ha affrontato lo studio della combustione di miscele ammoniacale/idrogeno in un motore monocilindrico ad accensione comandata, con l'obiettivo di analizzare in dettaglio l'evoluzione del processo di combustione al variare della composizione del combustibile attraverso una modellizzazione numerica. L'indagine è stata condotta mediante simulazioni tridimensionali impiegando il modello di combustione ECFM in combinazione con il modello di turbolenza RANS RNG $k - \epsilon$.

Il punto centrale dell'attività ha riguardato la calibrazione del parametro α_{stretch} , eseguita per una serie di punti operativi caratterizzati da differenti percentuali di idrogeno nella miscela, mantenendo costante la pressione all'aspirazione e variando il rapporto di equivalenza. Il parametro ha mostrato un'evoluzione monotona crescente all'aumentare della percentuale di idrogeno, con valori compresi in un range ristretto tra 0.03 e 0.12. Tale comportamento conferma la consistenza e la stabilità del modello nell'ampio intervallo di composizioni esaminate.

Le simulazioni hanno mostrato una buona capacità predittiva del modello nel descrivere l'andamento della pressione in camera e del tasso di rilascio di calore apparente ($AHRR$). Le curve numeriche seguono con accuratezza le forme sperimentali, con discrepanze contenute presenti soprattutto in prossimità dei picchi di pressione. Tali scostamenti, coerentemente con quanto riportato in letteratura (*Lhuillier et al.*, 2020) [14], possono essere in parte ricondotti alla semplificazione del modello di scambio termico parete/gas adottato nelle simulazioni. Infatti, nelle condizioni reali, le temperature di fiamma più elevate associate ad alte percentuali di idrogeno intensificano le perdite di calore alle pareti, effetto che tende a ridurre il picco sperimentale di $AHRR$ rispetto alla predizione numerica. In condizioni leggermente magre ($\Phi=0.8$), la discrepanza si riduce sensibilmente, coerentemente con la minore temperatura dei gas e quindi con l'attenuazione delle perdite termiche.

Complessivamente, i risultati ottenuti dimostrano che il modello ECFM, una volta calibrato, è in grado di descrivere in modo coerente e stabile il processo di combustione di miscele ammoniacale/idrogeno, confermandone l'idoneità per l'analisi numerica di sistemi *carbon-free*. Le differenze residue tra simulazioni e dati sperimentali sono attribuibili principalmente, oltre alle limitazioni dei modelli di scambio termico già descritte, anche alla complessità ancora rappresentata dalla chimica dell'ammoniaca.

Gli sviluppi futuri di questo lavoro potranno concentrarsi proprio sul perfezionamento della modellazione chimica dell' NH_3 , con particolare attenzione ai meccanismi cinetici e ai processi di formazione dei radicali intermedi, che rappresentano tuttora un tema di ricerca aperto e in costante aggiornamento. Negli ultimi anni, la combustione dell'ammoniaca ha infatti suscitato un interesse crescente nella comunità scientifica, con numerosi studi volti a migliorarne la comprensione poiché si è confermata un combustibile adatto per motori ad accensione comandata moderni, con nessuna o minime modifiche progettuali necessarie.

Un ulteriore avanzamento potrà derivare dall'impiego di modelli di turbolenza di tipo LES, che consentirebbero una descrizione più dettagliata delle fluttuazioni locali del fronte di fiamma e delle interazioni turbolenza/chimica, qui semplificate con un approccio RANS. Sarà inoltre di interesse esplorare differenti strategie di accensione e configurazioni della camera di combustione, con l'obiettivo di migliorare la stabilità del processo e ridurre ulteriormente le perdite termiche e le emissioni.

Oltre alla validità del modello numerico, anche il comportamento sperimentale del motore conferma il potenziale tecnico della combustione di tale miscela. Le emissioni di NO_x diminuiscono progressivamente al crescere della ricchezza della miscela, raggiungendo valori inferiori a 1000 ppmvw in condizioni ricche, mentre quelle di NH_3 incombusto risultano generalmente intorno all'1% in volume, con punte fino all'1,8% nelle condizioni più ricche [14]. L'idrogeno agendo come promotore di accensione, favorendo la propagazione del fronte di fiamma nelle prime fasi della combustione e migliorando la regolarità del ciclo, si è dimostrato efficace anche in piccole quantità, intorno al 10%.

Tutto quanto detto finora conferma che il motore analizzato, oltre ad essere riproducibile numericamente con buona affidabilità, costituisce una piattaforma reale promettente per lo sviluppo di strategie di combustione alternative.

Riferimenti bibliografici

- [1] Lhuillier, C., Brequigny, P., Contino, F., & Rousselle, C. (2019). *Performance and emissions of an ammonia-fueled SI engine with hydrogen enrichment*. SAE Technical Paper 2019-24-0137.
- [2] Heywood, J. B. (2018). *Internal Combustion Engine Fundamentals* (2^a ed.). New York: McGraw-Hill.
- [3] Lipatnikov, A. N., & Sabelnikov, V. A. (2022). *Karlovitz numbers and premixed turbulent combustion regimes for complex-chemistry flames*. *Energies*, 15(5840).
- [4] Peters, N. (1986). *Laminar flamelet concepts in turbulent combustion*. *Proceedings of the Combustion Institute*, 21(1), 1231–1250.
- [5] Sabelnikov, V., Lipatnikov, A., Bai, X.-S., & Swaminathan, N. (2022). *Turbulent flame structure and dynamics: combustion regimes*. In N. Swaminathan, X.-S. Bai, N. E. L. Haugen, C. Fureby, & G. Brethouwer (Eds.), *Advanced Turbulent Combustion Physics and Applications* (pp. 25–99). Cambridge University Press.
- [6] Borghi, R. (1985). *On the structure and morphology of turbulent premixed flames*. *Recent Advances in Aerospace Sciences*.
- [7] Poinso, T., & Veynante, D. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion*. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28.
- [8] Versteeg, H. K., & Malalasekera, W. (2007). *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method* (2^a ed.). Pearson Education.
- [9] Convergent Science. (2024). *CONVERGE 4 Manual*.
- [10] Colin, O., Benkenida, A., & Angelberger, C. (2003). *3D modeling of mixing, ignition and combustion phenomena in highly stratified gasoline engines*. *Oil & Gas Science and Technology – Revue d’IFP Energies Nouvelles*, 58(1), 47–62.

- [11] Suillaud, E., Truffin, K., Colin, O., & Veynante, D. (2022). *Direct numerical simulations of high Karlovitz number premixed flames for the analysis and modeling of the displacement speed*. Combustion and Flame, 236.
- [12] Sola, R., Baratta, M., Misul, D., D'Elia, M. et al. (2025). *Premixed Hydrogen-Methane Combustion Modelling in a Pre-Chamber RCEM with Flamelet-Based and Detailed-Chemistry Approaches*. SAE Technical Paper 2025-24-0046.
- [13] Klawitter, M., Wüthrich, S., Cartier, P., Albrecht, P., Herrmann, K., Gößnitzer, C., Pirker, G., & Wimmer, A. (2024). *Ammonia as a fuel: Optical investigation of turbulent flame propagation of NH_3/Air and $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{N}_2/\text{Air}$ flames at engine conditions*. Fuel, 375, 132616.
- [14] Lhuillier, C., Brequigny, P., Contino, F., & Mounaïm-Rousselle, C. (2020). *Experimental study on ammonia/hydrogen/air combustion in spark ignition engine conditions*. Fuel, 269, 117448.