



**Politecnico
di Torino**

Politecnico di Torino

Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica

A.a 2025/26

**Analisi numerico-sperimentale della
combustione in un motore GDI alimentato
ad ammoniacca/idrogeno tramite modello
flamelet G-equation**

**Effetto del rapporto di equivalenza e frazione di idrogeno sulla
calibrazione**

Relatori:

Prof. Mirko Baratta
Prof. Daniela Anna Misul

Candidato:

Gianmarco Fatica

Correlatore:

Mr. Riccardo Sola

Sommario

Introduzione	9
Elementi di teoria della combustione	13
1.1 La combustione premiscelata laminare	13
1.2 L'interazione combustione-turbolenza	15
1.3 Regimi di combustione e diagramma di Borghi-Peters	17
Principi di simulazione CFD	20
2.1 Equazioni di Navier-Stokes e media di Favre	21
2.2 Simulazione della turbolenza: modello k-ϵ	22
2.3 Presentazione del modello di combustione G-equation	23
2.4 Il modello di velocità turbolenta	32
Pratica sperimentale	34
3.1 Apparato sperimentale	34
3.2 Controparte numerica	36
Risultati di simulazione	40
4.1 Analisi dei risultati	43
4.2 Analisi della variabilità del parametro di calibrazione	49
4.3 Rassegna completa dei casi in esame	51
Caso T117	51
Caso T122	52
Caso T123	54
Caso T124	56
Caso T128	58
Caso T129	60
Caso T130	62
Caso T131	64

Caso T134	66
Caso T135	69
Caso T136	71
Caso T137	73
Caso T138	75
Caso T141	77
Caso T143	79
Caso T145	81
Caso T148	83
Caso T150	85
Caso T152	87
Conclusioni	89
Riferimenti bibliografici	91

Indice delle figure

Figura 1 - Andamento della temperatura normalizzata θ	14
Figura 2 - Diagramma di Borghi-Peters.....	19
Figura 3 - Evoluzione della variabile di progresso nel caso	31
Figura 4 - Schema del set-up sperimentale.....	34
Figura 5 – Rappresentazione della suddivisione della camera di combustione.	36
Figura 6 – Esempio di rappresentazione del dominio di temperatura [K].....	37
Figura 7 - Interfaccia di controllo del modello di combustione in CONVERGE	39
Figura 8 - Esempio di raffigurazione dei risultati ottenuti	41
Figura 9 - Confronto delle curve di pressione a parità di rapporto di equivalenza.....	43
Figura 10 - Confronto delle curve di pressione a parità di volume d'idrogeno.....	44
Figura 11 - Confronto delle curve di AHRR a parità di rapporto di equivalenza	44
Figura 12 - Confronto delle curve di AHRR a parità di volume d'idrogeno.....	45
Figura 13 - Confronto delle curve di MFB a parità di rapporto di equivalenza	46
Figura 14 - Confronto delle curve di MFB a parità di volume d'idrogeno.....	47
Figura 15 -Confronto curve di combustione sul diagramma Borghi-Peters.	47
Figura 16 - Evoluzione del fronte di fiamma visualizzata.....	48
Figura 17 - Variazione del parametro di calibrazione.....	49
Figura 18 - Curve di pressione, AHRR, MFB	51
Figura 19 - Curva di pressione caso T122.....	52
Figura 20 - Curva AHRR caso T122	52
Figura 21 - Curva MFB caso T122	53
Figura 22 - Grafico combustione di Borghi-Peters caso T122.....	53
Figura 23 - Curva di pressione caso T123.....	54
Figura 24 - Curva AHRR caso T123	54
Figura 25 - Curva MFB caso T123	55
Figura 26 - Diagramma Borghi-Peters caso T123	55
Figura 27 - Curva di pressione caso T124.....	56
Figura 28 - Curva AHRR caso T124	56
Figura 29 - Curva MFB caso T124	57
Figura 30 - Diagramma Borghi-Peters caso T124	57

Figura 31 - Curva di pressione caso T128.....	58
Figura 32 - Curva AHRR caso T128	58
Figura 33 - Curva MFB caso T128	59
Figura 34 - Diagramma Borghi-Peters caso T128	59
Figura 35 – Curva di pressione caso T129	60
Figura 36 - Curva di AHRR caso T129.....	60
Figura 37 - Curva di MFB caso T129.....	61
Figura 38 - Diagramma Borghi-Peters caso T129	61
Figura 39 - Curva di pressione caso T130.....	62
Figura 40 - Curva di pressione caso T130.....	62
Figura 41 - Curva di MFB caso T130.....	63
Figura 42 - Diagramma Borghi-Peters caso T130	63
Figura 43 - Curva di pressione caso T131.....	64
Figura 44 - Curva di AHRR caso T131.....	64
Figura 45 - Curva di MFB caso T131.....	65
Figura 46 - Diagramma Borghi-Peters caso T131	65
Figura 47 - Curva di pressione caso T134.....	67
Figura 48 - Curva di AHRR caso T134.....	67
Figura 49 - Curva di MFB caso T134.....	68
Figura 50 - Diagramma Borghi-Peters caso T134	68
Figura 51 - Curva di pressione caso T135.....	69
Figura 52 – Curva di AHRR caso T135	69
Figura 53 - Curva di MFB caso T135.....	70
Figura 54 - Diagramma di Borghi-Peters caso T135.....	70
Figura 55 - Curva di pressione caso T136.....	71
Figura 56 - Curva di AHRR caso T136.....	71
Figura 57 - Curva di MFB caso T136.....	72
Figura 58 - Diagramma di Borghi-Peters caso T136.....	72
Figura 59 - Curva di pressione caso T137.....	73
Figura 60 - Curva di AHRR caso T137.....	73
Figura 61 - Curva di MFB caso T137.....	74
Figura 62 - Diagramma di Borghi-Peters caso T137	74

Figura 63 - Curva di pressione caso T138.....	75
Figura 64 - Curva di AHRR caso T138.....	75
Figura 65 - Curva di MFB caso T138.....	76
Figura 66 - Diagramma Borghi-Peters caso T138	76
Figura 67 - Curva di pressione caso T141.....	77
Figura 68 - Curva di AHRR caso T141.....	77
Figura 69 - Curva di MFB caso T141.....	78
Figura 70 - Diagramma Borghi-Peters caso T141	78
Figura 71 - Curva di pressione caso T143.....	79
Figura 72 - Curva di AHRR caso T143.....	79
Figura 73 - Curva di MFB caso T143.....	80
Figura 74 - Diagramma Borghi-Peters caso T143	80
Figura 75 - Curva di pressione caso T145.....	81
Figura 76 - Curva di AHRR caso T145.....	81
Figura 77 - Curva di MFB caso T145.....	82
Figura 78 - Diagramma Borghi-Peters caso T145	82
Figura 79 - Curva di pressione caso T148.....	83
Figura 80 - Curva di AHRR caso T148.....	83
Figura 81 - Curva di MFB caso T148.....	84
Figura 82 - Diagramma Borghi-Peters caso T148	84
Figura 83 - Curva di pressione caso T150.....	85
Figura 84 - Curva di AHRR caso T150.....	85
Figura 85 - Curva di MFB caso T150.....	86
Figura 86 - Diagramma Borghi-Peters caso T150	86
Figura 87 - Curva di pressione caso T152.....	87
Figura 88 - Curva di AHRR caso T152.....	87
Figura 89 - Curva di MFB caso T152.....	88
Figura 90 - Diagramma di Borghi-Peters caso T152.....	88

Abstract

Il cambiamento climatico è una questione determinante per il presente e per il futuro del pianeta. Per far fronte a questa problematica l'UE ha varato il Green Deal, un insieme di iniziative volte a favorire la transizione energetica al fine di ridurre l'emissione di gas serra e raggiungere la neutralità climatica entro il 2050. Il settore dei trasporti genera il 24% dei gas serra emessi dall'unione europea, che sono costituiti per la maggior parte da CO₂, ovvero, il principale prodotto di combustione dei motori convenzionali. È chiaro che la decarbonizzazione della propulsione terrestre è fondamentale per il raggiungimento dell'obiettivo fissato. Data l'assenza di carbonio nella loro molecola, l'elevata densità energetica e la possibilità di produzione rinnovabile, ammoniaca e idrogeno costituiscono un'alternativa ai combustibili tradizionali; perciò, l'interesse sul loro comportamento come combustibili è in crescita. In questo contesto si colloca lo studio della loro combustione su base sperimentale e numerica. Attualmente G-equation è uno dei modelli più utilizzati a livello industriale e, generalmente non viene calibrato, di conseguenza risulta interessante analizzare la risposta del modello e la variazione del parametro di calibrazione al variare del rapporto di equivalenza e del volume di idrogeno della miscela di ammoniaca. La calibrazione è stata svolta variando uno dei coefficienti che determinano la velocità di combustione turbolenta e le simulazioni 3D di combustione sono state svolte sul software commerciale CONVERGE, al fine di replicare i risultati di un'ampia campagna sperimentale. I dati raccolti sono relativi alla combustione in un motore moderno di produzione industriale ad accensione comandata, modificato in modo tale da poter monitorare pressioni, temperatura e portate d'interesse per l'analisi sperimentale. La qualità dei risultati delle simulazioni è stata valutata sul diagramma di Borghi e attraverso il confronto tra curve simulate e reali, di pressione e di apparent heat release rate (AHRR). La calibrazione è stata svolta in modo tale che le curve simulate di pressione e AHRR si avvicinassero il più possibile alle corrispondenti curve medie sperimentali. I risultati dimostrano una discreta predittività locale del modello, in quanto la variazione del parametro di calibrazione è ridotta o nulla a determinate condizioni. Nello specifico, nel caso di rapporto stechiometrico la variazione del parametro in funzione del volume di idrogeno è soddisfacente. Differentemente, sia al

variare della quantità di idrogeno con miscele magre, sia al variare del rapporto di equivalenza stesso, è richiesta maggiore calibrazione. Inoltre, si mostra come la calibrazione puntuale fornisce una rappresentazione precisa e affidabile della combustione reale.

Introduzione

Il cambiamento climatico è ormai da vent'anni un argomento che accompagna strettamente lo sviluppo tecnologico e sempre di più la nostra quotidianità. A partire dal Protocollo di Kyoto (COP3-1997) i paesi più sviluppati hanno accettato di ridurre le emissioni di gas serra per ridurre l'inquinamento atmosferico e garantire un futuro al nostro pianeta. L'unione europea si è dimostrata determinata su questo obiettivo, anche attraverso la decarbonizzazione dei trasporti. Le normative sempre più stringenti hanno costretto la comunità scientifica ed industriale a cercare alternative sostenibili ai carburanti fossili per la propulsione dei veicoli. I recenti sviluppi geopolitici nel Golfo Persico hanno dimostrato che superare la dipendenza dai combustibili fossili tradizionali non è esclusivamente una priorità ambientale, ma un imperativo strategico per l'indipendenza politica ed economica dell'eurozona.

Ad oggi le alternative più discusse e note per il settore dei trasporti sono: i veicoli elettrici (EV), già disponibili sul mercato, e i veicoli ad idrogeno. A prima vista l'elettrificazione completa può sembrare la strada migliore per la decarbonizzazione dei trasporti e l'indipendenza europea dai paesi petroliferi. Purtroppo, questa soluzione non è priva di ostacoli. I produttori europei appaiono strutturalmente deboli rispetto alla controparte cinese, la quale detiene un primato tecnologico difficilmente colmabile nel breve termine. Inoltre, la produzione di veicoli elettrici introduce nuove sfide legate alla gestione delle materie prime critiche. Da un lato, la produzione di motori a magneti permanenti richiede l'impiego delle **Terre Rare (REE)**, quali Neodimio, Praseodimio e Disprosio, essenziali per garantire elevate densità di coppia ed efficienza energetica. Dall'altro, le batterie necessitano di **Metalli Critici (CMs)**, tra cui Litio, Cobalto, Nichel e Grafite. Tali risorse presentano una marcata **scarsità geologica** nel territorio dell'Unione Europea, determinando una vulnerabilità strutturale lungo l'intera catena del valore. Attualmente, la Repubblica Popolare Cinese detiene una posizione di **quasi-monopolio**, controllando non solo l'estrazione ma, soprattutto, i processi di raffinazione delle REE [1]. Tale egemonia industriale espone l'Europa a significativi **rischi geopolitici** e a potenziali interruzioni delle forniture [2]. Sebbene l'estrazione dei CMs sia geograficamente più diversificata [3], le criticità legate alla raffinazione e alla stabilità

dei mercati restano non trascurabili [2]. Di conseguenza, l'adozione completa della mobilità elettrica, pur riducendo le emissioni allo scarico, rischia di compromettere la **sovranità** europea, trasladando la dipendenza energetica dai combustibili fossili verso un nuovo paradigma di subordinazione mineraria.

L'**idrogeno molecolare** (H_2) si configura come alternativa notevole per la decarbonizzazione dei trasporti, sebbene il suo impiego presenti un bilancio complesso tra vantaggi e criticità. Il principale pregio dell'idrogeno risiede nella sua elevata **densità energetica gravimetrica** (circa 120 MJ/kg, quasi tre volte superiore a quella dei combustibili fossili tradizionali). Questa caratteristica lo rende un'alternativa promettente in particolare per i trasporti pesanti, marittimi e per l'aviazione, ambiti in cui il peso e l'ingombro dei pacchi batteria limiterebbero drasticamente il carico utile e l'autonomia del veicolo. Inoltre, in un'ottica di diversificazione energetica, l'idrogeno può essere adoperato per la generazione elettrica su larga scala, potendo essere impiegato come combustibile in turbine a gas [4]. Tuttavia, l'effettivo beneficio ambientale associato a questo vettore è strettamente subordinato al suo processo di sintesi. Per garantire una reale decarbonizzazione, l'idrogeno deve essere ricavato mediante processi di elettrolisi alimentati da fonti rinnovabili o, in alternativa, da energia nucleare, azzerando le emissioni atmosferiche a monte del sistema. Inoltre, l'utilizzo dell'idrogeno deve affrontare limitazioni tecniche e termodinamiche significative, la bassa **densità energetica volumetrica** a pressione atmosferica, che impone lo stoccaggio ad altissime pressioni (fino a 700 bar per le applicazioni automotive) o la liquefazione a temperature criogeniche (-253°C), comportando un notevole dispendio energetico. Dal punto di vista impiantistico, il trasporto e lo stoccaggio dell' H_2 richiedono materiali avanzati per mitigare fenomeni di degradazione strutturale, come l'**infragilimento da idrogeno**, oltre a sistemi di tenuta specifici dovuti all'elevata permeabilità della molecola. Queste criticità richiedono infrastrutture nuove e impediscono un eventuale riconversione degli attuali gasdotti o sistemi di stoccaggio normalmente diffusi. Allo stesso tempo non è trascurabile il rischio introdotto dallo stoccaggio d'idrogeno, si pensi alle norme stringenti da cui è regolato.

L'ammoniaca (NH_3), a differenza dell'idrogeno, potrebbe affermarsi come uno dei vettori energetici migliori per la decarbonizzazione del settore dei trasporti, grazie a un insieme

di proprietà fisico-chimiche che ne favoriscono l'impiego su larga scala. Dal punto di vista dello stoccaggio e del trasporto, l' NH_3 presenta vantaggi considerevoli: essa può essere liquefatta a pressione atmosferica a $-33\text{ }^\circ\text{C}$, oppure mantenuta allo stato liquido a temperatura ambiente con una pressione moderata di circa 8–10 bar, condizioni tecnologicamente ben consolidate nell'industria chimica globale [4]. La sua densità energetica volumetrica, pari a circa 12,7 MJ/L allo stato liquido, supera quella dell'idrogeno liquido (8,5 MJ/L) e risulta compatibile con infrastrutture di stoccaggio e distribuzione già esistenti, ereditate dalla filiera della sintesi di Haber-Bosch, il che abbate significativamente i costi di transizione infrastrutturale [5]. Tuttavia, l'ammoniaca presenta anche criticità non trascurabili: la sua tossicità impone stringenti requisiti di sicurezza in fase di manipolazione e distribuzione; la sua corrosività nei confronti di leghe a base di rame e zinco vincola la scelta dei materiali nei sistemi di bordo; e la sua bassa velocità di fiamma laminare (circa 0,07 m/s, contro 0,37 m/s della benzina) rende la combustione diretta instabile e difficilmente controllabile nei motori convenzionali, determinando elevate emissioni di NH_3 incombusta e ossidi di azoto (NO_x). È proprio per ovviare a queste limitazioni che la combustione sinergica di ammoniaca e idrogeno sta destando interesse nei motori a combustione interna. L'idrogeno, caratterizzato da un'elevata velocità di fiamma (circa 2,9 m/s) e da un'ampia finestra di infiammabilità, agisce come promotore di combustione, stabilizzando il fronte di fiamma e migliorando sensibilmente la combustione anche a basse concentrazioni volumetriche (tipicamente 5–30% vol. di H_2 nella miscela). Tale sinergia consente di ridurre drasticamente le emissioni di NH_3 incombusta e di contenere la formazione di NO_x attraverso una calibrazione ottimizzata dei parametri di iniezione e del rapporto di miscela, avvicinando le prestazioni termodinamiche del ciclo a quelle ottenibili con combustibili tradizionali [6]. Un ulteriore vantaggio di questa configurazione risiede nella possibilità di produrre l'idrogeno in loco per decomposizione catalitica parziale dell'ammoniaca stessa (cracking), eliminando la necessità di uno stoccaggio separato di H_2 a bordo, con evidenti benefici in termini di sicurezza e semplicità impiantistica [7]. Pertanto, facilità di stoccaggio, di trasporto e di utilizzo dell'ammoniaca la rendono un candidato interessante per fungere da vettore energetico tra la produzione di energia sostenibile e le domande energetiche mobili e statiche [5]. La modellazione fluidodinamica computazionale (CFD) della combustione

di miscele ammoniac-idrogeno rappresenta un ambito di ricerca ancora parzialmente inesplorato rispetto agli idrocarburi convenzionali; per tale ragione, il settore sta beneficiando di un crescente interesse in ambito sperimentale. Il presente lavoro si inserisce in questo contesto, ponendosi l'obiettivo di valutare le **capacità** del modello di combustione **G-equation** nella simulazione di fiamme turbolente di NH_3 e H_2 . A tal fine questo elaborato si apre con una trattazione dei fondamenti teorici della combustione premiscelata, ripercorrendo il passaggio dal regime laminare a quello turbolento e introducendo gli strumenti concettuali, tra cui il diagramma di Borghi-Peters, necessari a comprendere i fenomeni analizzati. Su questa base, viene illustrato il set-up di simulazione CFD adottato, fondato sulla formulazione mediata di Favre delle equazioni di Navier-Stokes, sul modello di turbolenza $k-\varepsilon$ e sul modello di combustione G-equation. La parte centrale descrive la configurazione sperimentale di riferimento e la sua controparte numerica, illustrando le scelte di modellazione e le condizioni operative. Infine, lo studio analizza la risposta del modello al variare del rapporto di equivalenza (ϕ) e della **frazione volumetrica** di idrogeno, investigandone l'impatto sulla struttura del fronte di fiamma.

Elementi di teoria della combustione

I casi di riferimento analizzati riguardano la combustione in un motore alimentato da ammoniacca e idrogeno premiscelati. Il presente capitolo si propone pertanto di introdurre i principi fondamentali della combustione turbolenta premiscelata, trattando inizialmente la combustione premiscelata laminare, per poi esaminare gli effetti della sua interazione con la turbolenza e concludere con il diagramma di Borghi-Peters, strumento classico per la classificazione e l'analisi dei regimi di combustione turbolenta.

1.1 La combustione premiscelata laminare

La combustione è un processo chimico-fisico di ossidazione esotermica in cui un combustibile reagisce con un ossidante, tipicamente l'ossigeno dell'aria, liberando energia sotto forma di calore e luce. Nei motori a combustione interna, questo processo costituisce il meccanismo fondamentale di conversione dell'energia chimica del carburante in lavoro meccanico. Nelle **fiamme premiscelate** combustibile e ossidante sono miscelati in una specifica proporzione prima dell'innescò. La reazione avviene attraverso il fronte di fiamma che si propaga nel gas fresco con una velocità determinata dalla cinetica chimica e dalle proprietà termiche della miscela. Il quale è una struttura stratificata e sottile, di **spessore caratteristico** l_f , al cui interno si individuano i gradienti di temperatura e di concentrazioni chimiche determinati dalla combustione. È suddiviso in tre zone:

- **Zona di preriscaldamento:** in questa zona la reazione chimica è circoscritta alla formazione di radicali liberi precursori della reazione esotermica. Qui la temperatura cresce dal valore determinato dai gas incombusti fino alla temperatura di innescò, al di sopra della quale la cinetica diventa sufficientemente rapida da sostenere la reazione.
- **Inner layer (δ):** dove avvengono le reazioni più rapide e determinanti per il rilascio di calore della combustione; infatti, è caratterizzato da un aumento estremamente rapido della temperatura.

- **Zona di ossidazione:** in cui si verificano le ultime reazioni di ossidazione che determinano la composizione finale dei gas combusti e la parte finale della reazione esotermica.

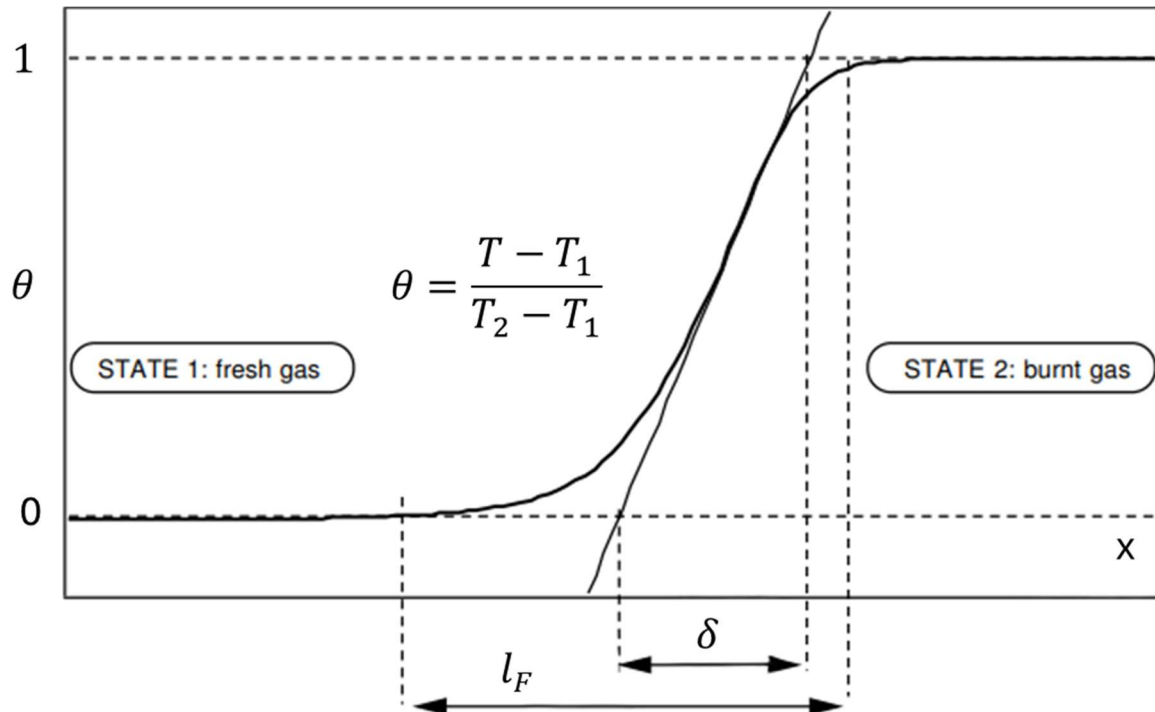


Figura 1 - Andamento della temperatura normalizzata θ lungo il dominio di combustione. T_1 : reagenti, T_2 : prodotti

Inner layer e zona di ossidazione formano la **zona di reazione** che individua la parte in cui avviene la quasi totalità della trasformazione chimica con rilascio di calore.

La velocità con cui propaga il fronte è detta **velocità di fiamma laminare s_L** , è misurata in direzione perpendicolare alla superficie della fiamma ed è rivolta verso i gas incombusti. La sua definizione non è univoca e può essere distinta tra:

- **assoluta:** misura lo spostamento rispetto un sistema di riferimento fisso nello spazio di laboratorio;
- **di spostamento:** misurata rispetto ad un sistema di riferimento solidale ai gas incombusti;
- **di consumo:** misura la velocità con cui la fiamma consuma i reagenti, dipende esclusivamente dalla velocità di reazione chimica.

Quest'ultima è la più utile per comprendere la differenza sostanziale tra combustione premiscelata laminare e turbolenta perché rende più intuitivo capire la differenza tra velocità di combustione laminare e turbolenta.

1.2 L'interazione combustione-turbolenza

La turbolenza nei motori a combustione interna è generata principalmente dai moti organizzati della carica (tumble, swirl e squish) durante la fase di aspirazione e compressione. Le strutture vorticosi interagiscono con il fronte di fiamma determinando un significativo incremento della velocità di consumo della massa e dello spessore complessivo della fiamma. Quest'interazione è un fenomeno complesso che agisce attraverso diversi meccanismi:

- **corrugamento del fronte di fiamma:** i vortici della turbolenza deformano e increspano il fronte, determinando l'incremento della superficie di scambio rispetto a quella planare associata alla fiamma perfettamente laminare. Poiché la portata di miscela fresca consumata è proporzionale all'area del fronte, questo meccanismo incrementa la velocità di consumo del combustibile. Localmente le pieghe che formano il fronte di fiamma turbolento propagano ancora con velocità laminare. Tuttavia, globalmente, quindi su tutto il fronte, l'incremento della velocità di consumo dei reagenti determina la **velocità di combustione turbolenta s_T** ;
- **trasporto turbolento:** i vortici sottraggono calore e specie parzialmente combuste dal fronte di fiamma, trasportandoli verso i reagenti. Questo fenomeno accelera il trasporto di calore e massa attraverso il fronte di fiamma e perciò la velocità della reazione.

La velocità di combustione turbolenta ricopre un ruolo fondamentale in G-equation e viene pertanto approfondita nel capitolo successivo, nella sezione dedicata al [modello di velocità turbolenta](#).

Le caratteristiche con cui è definita la turbolenza sono l'intensità e la dimensione dei vortici. In letteratura [8][9] l'intensità della turbolenza è comunemente definita dal valore quadratico medio (RMS) della sua velocità, in questo testo indicata come v' . La dimensione dei vortici copre un ampio spettro di scale spaziali; l'energia associata a

queste macrostrutture viene trasferita, tramite il meccanismo della cascata energetica, verso scale progressivamente minori. I grandi vortici, dell'ordine della scala integrale l_t , contengono la maggior parte dell'energia cinetica turbolenta. La loro energia viene trasferita progressivamente verso scale sempre più piccole, attraverso la frammentazione dei vortici, fino alla scala di Kolmogorov. Infine, i vortici si dissipano definitivamente sotto forma di calore per effetto delle forze viscosse.

La natura dell'interazione fiamma-turbolenza dipende fortemente dal rapporto tra le scale caratteristiche della turbolenza e quelle della fiamma. La classificazione dei regimi si basa sui seguenti parametri adimensionali che confrontano queste scale.

Il **numero di Reynolds turbolento** rappresenta il rapporto tra le forze d'inerzia e viscosa:

$$Re = \frac{v'l}{s_L l_F}, \quad (1.2)$$

dove l è la dimensione delle strutture vorticose. Su scala integrale le forze d'inerzia risultano predominanti, pertanto le strutture vorticose di maggiori dimensioni sono caratterizzate da elevati valori di Re . Viceversa, la scala di Kolmogorov rappresenta la dimensione alla quale la turbolenza si estingue, poiché le forze d'inerzia e quelle viscosse si bilanciano, determinando un valore di Re prossimo all'unità.

Il **numero di Damköhler** confronta due scale temporali:

$$Da = \frac{\tau}{\tau_c} = \frac{l/v'}{l_F/s_L} \quad (1.3)$$

La scala di tempo caratteristico della turbolenza τ , ovvero il periodo di tempo impiegato dalla turbolenza per effettuare una rotazione completa. La scala temporale chimica τ_c è il tempo di residenza dei reagenti all'interno della fiamma laminare. Per valori elevati del numero di Damköhler ($Da \gg 1$) i tempi chimici sono ridotti rispetto i tempi di turbolenza. In questo caso la turbolenza non incide sulla struttura del fronte di fiamma, che rimane prossima a quella di una fiamma laminare corrugata dai moti turbolenti: si parla in questo caso di regime *flamelet*. Al contrario, per bassi valori del numero di Damköhler ($Da \ll 1$), il tempo chimico è maggiore. La velocità di reazione complessiva è

pertanto controllata dalla cinetica chimica, mentre il mescolamento tra reagenti e prodotti è governato dalla turbolenza.

Il numero di Karlovitz:

$$Ka = \frac{1}{Da(\eta_k)} = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \left(\frac{l_F}{\eta_k}\right)^2 \quad (1.4)$$

anch'esso come il Damköhler confronta due scale temporali. La differenza tra i due è legata alla scala spaziale su cui sono definiti. Il numero di Karlovitz è prettamente definito sulla scala di Kolmogorov, a differenza del numero di Damköhler che caratterizza vortici di grande dimensione [8].

La grandezza della scala integrale solitamente è paragonabile alle dimensioni del flusso turbolento. La scala di Kolmogorov η_k rappresenta la dimensione minima in cui è possibile individuare ancora una struttura vorticoso distinguibile, ed è determinata dalla viscosità ν del fluido e dal tasso di dissipazione ε dell'energia cinetica del flusso. Da cui si definisce [9]:

$$\eta_k = (\nu^3/\varepsilon)^{\frac{1}{4}} \quad (1.1)$$

1.3 Regimi di combustione e diagramma di Borghi-Peters

I numeri di Damköhler e Karlovitz possono essere usati per definire differenti regimi di combustione in funzione dei rapporti di velocità (v'/s_L) e di lunghezza (l/l_F). Al fine di rappresentarli graficamente Borghi ha sviluppato un diagramma, successivamente esteso da Peters, che pertanto prende il nome di diagramma di Borghi-Peters. L'asse delle ascisse riporta il rapporto delle scale di lunghezza, mentre l'asse delle ordinate riporta il rapporto delle scale di velocità; entrambi gli assi sono rappresentati in scala logaritmica. Le linee che delimitano le regioni, e i relativi regimi di combustione, corrispondono a valori costanti dei parametri adimensionali. È opportuno sottolineare che i criteri e i limiti dei regimi di combustione si fondano esclusivamente su stime dell'ordine di grandezza e non su derivazioni analitiche rigorose. Si individuano le seguenti regimi:

- **Regime laminare ($Re < 1$):** la turbolenza è trascurabile e la fiamma si propaga come in condizioni laminari.

I regimi elencati successivamente sono tutti da caratterizzati da $Re > 1$ e quindi turbolenti.

- **Regime flamelets ($Ka < 1$):** lo spessore del fronte di fiamma è più piccolo della scala di Kolmogorov. Quindi i vortici turbolenti non penetrano nel fronte di fiamma e deformano il fronte senza perturbarne la struttura interna. Il regime flamelets a sua volta si distingue in:
 - ❖ wrinkled flamelets ($v' < s_L$): la turbolenza è debole e deforma solo leggermente il fronte.
 - ❖ corrugated flamelets ($v' > s_L$): la turbolenza è più intensa e produce un corrugamento significativo del fronte, la fiamma è localmente laminare (struttura flamelets) ma globalmente molto corrugata.
- **Thin reaction zones ($1 < Ka < 100$):** i vortici di Kolmogorov penetrano nella zona di preriscaldamento, aumentando il trasporto termico e di specie. La zona di reazione interna (inner layer) rimane tuttavia intatta. La fiamma mantiene una struttura riconoscibile, ma la zona di preriscaldamento è più spessa rispetto al caso laminare.
- **Broken reaction zones ($Ka > 100$):** i vortici di Kolmogorov sono abbastanza piccoli da penetrare nella zona di reazione interna, estinguendola localmente. Il fronte di fiamma perde la sua struttura sottile e la reazione tende a distribuirsi su volumi estesi.

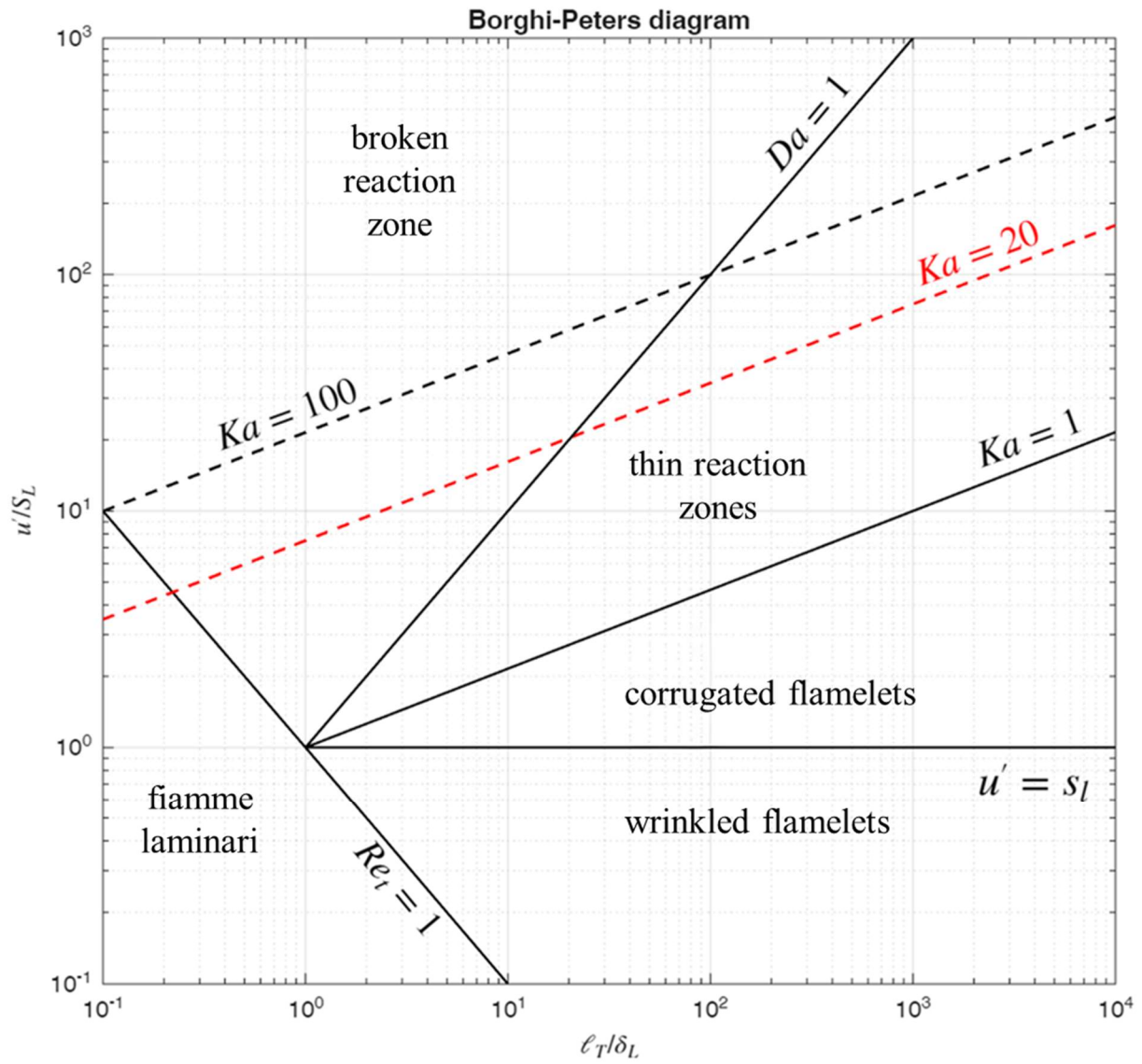


Figura 2 - Diagramma di Borghi-Peters. La notazione dei rapporti in ascissa e ordinata è differente da quella nel testo, ma il significato è analogo.

Principi di simulazione CFD

La combustione è un fenomeno molto complesso, influenzato da molteplici fenomeni fluidodinamici e termici oltre che chimici. La simulazione numerica al computer è tutt'altro che banale, richiede la risoluzione di formule complesse associate ai fenomeni precedentemente citati. L'affidabilità e la precisione dei risultati dipendono dalla qualità e dalla tipologia di modello usato. La computer fluid dynamics (CFD) 3D si suddivide in tre modalità di risoluzione dei modelli:

-Direct Numerical Simulation (DNS): risolve istante per istante le equazioni di equilibrio di Navier-Stokes, simula esattamente tutte le scale di turbolenza del fenomeno e i loro effetti sulla combustione. È la più precisa delle tre perché riproduce esattamente come si svolge la combustione nel tempo come se fosse un sensore che effettivamente rileva l'andamento della combustione. Il prezzo di questa precisione è un elevato costo computazionale dovuto alla finezza della griglia, è quindi possibile simulare solo fenomeni semplici.

-Reynolds Avaraged Navier Stokes (RANS): elabora le equazioni di Navier-Stokes che ricevono in ingresso grandezze mediate. Sfrutta dei modelli di turbolenza e combustione come regole di chiusura delle equazioni mediate che descrivono le variazioni delle grandezze fisiche e chimiche d'interesse. Restituisce un campo di grandezze medie, ad esempio di temperatura, costanti rispetto al tempo, perciò la combustione appare statica. Non è quindi in grado di rappresentare alcun tipo di fluttuazione. Il vantaggio del RANS è il costo computazionale ridotto che consente di simulare anche fenomeni complessi. L'attendibilità dei risultati è strettamente legata alla qualità dei modelli di chiusura dell'equazioni medie.

-Large Eddy Simulation (LES): è un compromesso tra RANS e DNS perché risolve esplicitamente le turbolenze su grande scala, ma richiede dei modelli di chiusura per le turbolenze più piccole. Il risultato è quindi un campo medio variabile nel tempo che coglie solo variazioni ampie tralasciando le più piccole, di conseguenza anche il costo computazionale è intermedio tra RANS e DNS.

Il motore con cui sono stati ricavati i dati sperimentali è ad accensione comandata ed iniezione diretta (GDI), però il set up operativo prevede che la miscela di ammoniaca e idrogeno arrivi premiscelata in camera senza alcun tipo di iniezione. Le caratteristiche costruttive del motore, in particolare del cielo del pistone, determinano un moto turbolento in camera. È quindi possibile affermare che la combustione trattata è di tipo turbolento premiscelato. La turbolenza è stata risolta in RANS, utilizzando la media di Favre per le equazioni di Navier-Stokes e il modello $k-\varepsilon$ per determinare il tensore degli sforzi di Reynolds, termine irrisolto che nasce mediando le equazioni. Le reazioni chimiche al bordo di fiamma e nella regione combusta sono state risolte con il Chemical Equilibrium Model (CEQ). Per rappresentare l'interazione tra la reazione di combustione e la turbolenza in camera è stato utilizzato G-Equation, con l'obiettivo di valutare l'affidabilità e la predittività di questo modello su un ampio spettro di punti operativi. La calibrazione è stata svolta variando uno dei coefficienti che determinano la velocità di combustione turbolenta in modo tale che le curve simulate di pressione e AHRR si avvicinassero il più possibile alle corrispettive curve medie sperimentali. La velocità di combustione turbolenta (s_T) non è nota a priori ed è stata calcolata con la relazione di Peter. Per chiarezza è quindi necessario sottolineare che la velocità turbolenta, e con lei la relazione che la calcola, è il fattore che determina l'accuratezza, o meno, della simulazione.

2.1 Equazioni di Navier-Stokes e media di Favre

Il punto di partenza della combustione di flussi turbolenti sono le equazioni di Navier-Stokes. Ovvero equazioni differenziali alle derivate parziali che modellano il moto dei fluidi viscosi (liquidi e gas), basandosi sulla conservazione della quantità di moto, della massa e del bilancio di entalpia. La risoluzione puntuale di tali equazioni in un dominio di simulazione che approssima la realtà, richiederebbe costi e tempi computazionali eccessivamente onerosi. Perciò nasce l'approccio RANS che attraverso la media di Reynolds risolve i campi medi delle grandezze d'interesse. L'utilizzo della media di Reynolds per flussi a densità variabile introduce numerose correlazioni non chiuse tra una generica grandezza \bar{f} e le fluttuazioni di densità. Tali correlazioni sono difficilmente gestibili dai codici CFD, perciò le equazioni sono mediate in funzione della densità. Questa tipologia di media pesata prende il nome di media di Favre. Come per Reynolds

una grandezza generica f è divisa nella somma di un valore medio (\sim) e un di una fluttuazione ($''$):

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (2.1)$$

Dove la fluttuazione f'' è pari a zero e \tilde{f} è la media calcolata come:

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}, \quad (2.2)$$

ricavando $\bar{\rho}$ e \tilde{f} dalle rispettive medie temporali di Reynolds (o medie di insieme) riferite all'intervallo di tempo t .

2.2 Simulazione della turbolenza: modello k- ϵ

L'utilizzo della media di Favre determina la nascita delle tensioni turbolente di Reynolds $\bar{\rho} \widetilde{v_i'' v_j''}$. Questo termine aperto è risolto attraverso un modello di turbolenza. La turbolenza può essere descritta come la fluttuazione di tutte le proprietà locali di un fluido, alimentata dall'elevata quantità di energia cinetica k associata al fluido stesso. Tali fluttuazioni si manifestano attraverso strutture vorticosi le cui dimensioni variano su diverse scale spaziali; l'energia associata a queste macrostrutture viene trasferita, tramite il meccanismo della cascata energetica, verso scale progressivamente minori. In questa fase, l'intervento della dissipazione viscosa smorza l'intensità del moto fino alla sua completa estinzione in corrispondenza delle scale molecolari (scale di Kolmogorov), dove l'energia cinetica viene definitivamente convertita in calore. Perciò, questo fenomeno può essere caratterizzato attraverso l'energia cinetica k e il tasso di dissipazione viscosa ϵ . Dall'assunzione proposta da Boussinesq per la viscosità turbolenta [8] le tensioni turbolente di Reynolds sono descritte come:

$$\bar{\rho} \widetilde{v_i'' v_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{v}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{v}_k}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho} k \quad (2.1)$$

Dove δ_{ij} è il delta di Kronecker e μ_t è la viscosità turbolenta dinamica. Quest'ultima non è univocamente definita. Uno dei modelli più utilizzati, nonché quello usato per svolgere le simulazioni successivamente esposte, la definisce come:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (2.2)$$

funzione di k e ε , perciò il modello è chiamato k - ε . Nello specifico è stata utilizzata la versione RNG del modello k - ε proposta da CONVERGE. k e ε sono stimate da equazioni di trasporto consultabili sul manuale del software [10]. La peculiarità della versione RNG offerta dal solutore è la presenza dei termini S_s e di $F'_{drag,i}$. Il primo, S_s , è un termine sorgente che rappresenta l'interazione tra la turbolenza e il fluido, e $F'_{drag,i}$ è la forza aereodinamica che agisce sulle gocce di fluido. Le equazioni adoperate si avvalgono delle costanti riportate nella Tabella 1, per le quali sono indicati i valori adottati nelle successive simulazioni:

Tabella 1 – Valori utilizzati per le costanti del modello RNG k - ε

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

I vantaggi che determinano la diffusione di questo modello di chiusura sono semplicità e robustezza, inoltre garantisce risultati efficaci con un costo computazionale favorevole. Tuttavia, è caratterizzato anche da alcuni svantaggi. Il più importante è l'assunzione implicita di elevati numeri di Reynolds e di una turbolenza omogenea e isotropa; pertanto, sono richiesti opportuni adattamenti per l'applicazione a flussi caratterizzati da bassi numeri di Reynolds [8].

2.3 Presentazione del modello di combustione G-equation

G-Equation è un modello che si basa sull'approccio level-set, ovvero assegna un campo tridimensionale al dominio di riferimento e calcola la superficie "iso-valore" G_0 per rappresentare il fronte di fiamma all'istante t . G è una grandezza scalare funzione del tempo e di una coordinata dello spazio, generalmente x , che definisce il fronte di fiamma in tutte e tre le dimensioni. G_0 è un numero scelto arbitrariamente ma fisso per tutto l'evento di combustione. Il fronte di fiamma, individuato da G_0 , divide la zona dei gas combustibili dalla zona dei gas incombustibili, a cui rispettivamente corrispondono valori di $G > G_0$ e $G < G_0$. Siccome la fiamma è rappresentata come una superficie sottile, questo metodo è particolarmente adatto alla rappresentazione del regime flamelet che è

proprio contraddistinto dallo spessore della fiamma estremamente ridotto. Spessore più piccolo della minore delle scale di turbolenza inerziale. Il modello non si limita alla descrizione del regime **flamelet**, essendo possibile derivare una formulazione relativa alla **thin reaction zone**. L'integrazione di entrambi gli approcci permette di ottenere un'unica trattazione, capace di tracciare il fronte di fiamma in entrambi i regimi.

Formulazione per il Corrugated Flamelet Regime

La superficie iso-valore definita come:

$$G(x, t) = G_0 \quad (2.3)$$

definisce la posizione x del fronte di fiamma in ogni istante di tempo t . La velocità di propagazione del fronte dx_f/dt , è ricavata dalla somma vettoriale della velocità del flusso d'aria v su cui si sviluppa la combustione e la velocità di combustione laminare normale alla fiamma s_L .

$$\frac{dx_f}{dt} = \mathbf{v} + \mathbf{n} s_L . \quad (2.4)$$

Dove \mathbf{n} è il vettore normale al fronte di fiamma e rivolto verso i gas incombusti, definito come:

$$\mathbf{n} = - \frac{\nabla G}{|\nabla G|} \quad (2.5)$$

Adesso derivando la (2.3) rispetto al tempo si ricava:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \nabla G \cdot \frac{dx_f}{dt} = 0 , \quad (2.6)$$

e infine sostituendo la (2.4) e $\nabla G = -\mathbf{n} |\nabla G|$ si giunge a:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = s_L |\nabla G| . \quad (2.7)$$

Questa è l'equazione di trasporto nota in letteratura come G-equation. Il modello è applicabile per fronti di fiamma sottili, tipici del regime flamelet; perché, in questa condizione, lo spessore della fiamma è più piccolo della scala di turbolenza di Kolmogorov. I termini a sinistra dell'uguale sono il termine di accumulo e di convezione, rappresentano rispettivamente la variazione del campo rispetto al tempo e la propagazione della fiamma dovuto alla portata. Il termine a destra rappresenta la

propagazione dovuta alla combustione. A questo punto si intuisce che la fiamma venga descritta come una superficie trasportata dal campo di moto turbolento e che, allo stesso tempo, si propaghi verso i reagenti incombusti per effetto della combustione stessa. La scelta più comune stabilisce che la superficie iso-valore G_0 giaccia sul lato incombusto, d'avanti al fronte di fiamma, rappresentando quindi il confine oltre cui i reagenti iniziano a trasformarsi in prodotti. I valori della velocità del flusso e di combustione devono essere noti e riferiti alla superficie $G(x, t) = G_0$. La (2.4) descrive la dinamica di una superficie bidimensionale; quindi, solo il valore che definisce il fronte di fiamma è univocamente definito, il campo G che circonda la superficie varia a seconda della funzione particolare scelta per risolvere l'equazione di trasporto. Considerando la velocità laminare \mathbf{s}_L costante si potrebbe incorrere in delle cuspidi, è opportuno allora considerare una formulazione che consideri anche gli effetti di allungamento e curvatura della fiamma.

$$\mathbf{s}_L = \mathbf{s}_L^0 - \mathbf{s}_L^0 \mathcal{L} \kappa - \mathcal{L} S \quad (2.8)$$

Dove \mathbf{s}_L^0 è la velocità di combustione laminare della fiamma laminare non deformata, κ la curvatura e S la deformazione della fiamma. La curvatura è definita come:

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n} = - \frac{\nabla^2 G - \mathbf{n} \cdot \nabla (\mathbf{n} \cdot \nabla G)}{|\nabla G|} \quad (2.9)$$

Per convenzione positiva se la parte convessa è rivolta verso la zona incombusta. La deformazione dovuta al gradiente di velocità è data da:

$$S = -\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}. \quad (2.10)$$

\mathcal{L} è la lunghezza di Markstein e ha lo stesso ordine di grandezza dello spessore di fiamma laminare l_f e misura la sensibilità della velocità di fiamma alla curvatura e deformazione del fronte. Sostituendo la (2.8) nella (2.7) si ricava:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = \mathbf{s}_L^0 |\nabla G| - \mathbf{s}_L^0 \mathcal{L} \kappa |\nabla G| - \mathcal{L} S |\nabla G| \quad (2.11)$$

Le differenze principali tra la (2.11) e la (2.7) è la presenza del termine diffusivo, $\mathbf{s}_L^0 \mathcal{L} \kappa |\nabla G|$, e del termine di deformazione. Inoltre, necessita anche delle condizioni al bordo per ogni iso-superficie di G oltre alle condizioni iniziali.

Formulazione per il Thin Reaction Zone Regime

Il thin reaction zone regime è caratterizzato dall'ingresso di vortici turbolenti, dell'ordine di grandezza della scala di Kolmogorov, all'interno della zona di preriscaldamento. Ciò comporta l'ispessimento e una marcata perturbazione della struttura di fiamma. Conseguentemente la velocità di combustione laminare, non più ben definita, e la superficie $G(x, t) = G_0$, sottile per definizione, risultano non adatti alla descrizione dell'avanzamento del fronte di fiamma. Pertanto, la (2.7) o la (2.11) non rappresentano correttamente questo regime ed è necessaria una equazione di trasporto specifica. Dato che l'inner layer conserva la struttura sottile ed è la parte di fiamma che mantiene attivo il processo di combustione, è la superficie più adatta ad essere rappresentata con l'approccio level set. Può essere tracciato attraverso la superficie $T(x, t) = T_0$, dove T_0 è la temperatura caratteristica dell'inner layer stesso. Si introduce l'equazione di trasporto del campo scalare di temperatura:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla T = \nabla \cdot (\rho D \nabla T) + \omega_T \quad (2.12)$$

dove ρ è la densità, D la diffusività termica e ω_T un termine sorgente che rappresenta l'esotermia della combustione. L'obiettivo è impostare una G-equation che coincida con la iso-superficie T_0 , definita da:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla T \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} \Big|_{T=T_0} = 0 \quad (2.13)$$

Inoltre, serve definire:

$$\mathbf{n} = - \frac{\nabla T}{|\nabla T|} \quad (2.14)$$

versore ad essa perpendicolare, coincidente con il versore \mathbf{n} perpendicolare alla superficie definita da G_0 , e la sua velocità:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v} + \mathbf{n} s_d \quad (2.15)$$

Con s_d velocità di propagazione di una iso-superficie di uno scalare diffusivo non reattivo, definita da Gibson (1968) come:

$$s_d = \left[\frac{\nabla \cdot (\rho D \nabla T) + \omega_T}{\rho |\nabla T|} \right] \quad (2.16)$$

che se sostituite nell'equazione di campo di G (2.6) portano a:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = \left[\frac{\nabla \cdot (\rho D \nabla T) + \omega_T}{\rho |\nabla T|} \right] |\nabla G|. \quad (2.17)$$

Peters ha dimostrato che il termine nelle parentesi quadre può essere diviso in due termini che valutano rispettivamente la curvatura e la diffusione della iso-superficie:

$$\nabla \cdot (\rho D \nabla T) = -\rho D |\nabla T| \nabla \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot \nabla (\rho D \mathbf{n} \cdot \nabla T) \quad (2.18)$$

Sostituendo la (2.18) nella (2.15) e definendo:

$$s_n = \frac{\mathbf{n} \cdot \nabla (\rho D \mathbf{n} \cdot \nabla T)}{\rho |\nabla T|}, \quad (2.19)$$

$$s_r = \frac{\omega_T}{(\rho |\nabla T|)}, \quad (2.20)$$

rispettivamente contributo della velocità dovuto alla diffusione normale e alla reazione, si ricava:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = (s_n + s_r) |\nabla G| - D \kappa |\nabla G|. \quad (2.21)$$

La loro somma nel caso di fiamma planare non deformata sarebbe uguale alla velocità di combustione s_L^0 . Invece nel caso di thin reaction zone definiscono:

$$s_{L,S} = s_n + s_r. \quad (2.22)$$

Queste due velocità non coincidono ma simulazioni DNS svolte da Peters (1998) dimostrano che hanno lo stesso ordine di grandezza. A questo punto è possibile riportare la forma definitiva di G-equation per il regime thin reaction zone:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla G = s_{L,S} |\nabla G| - D \kappa |\nabla G| \quad (2.23)$$

Anche in questo caso l'equazione è definita solo sul bordo di fiamma, così come \mathbf{v} , $s_{L,S}$ e D sono valutati su di esso. Inoltre, è opportuno sottolineare che questo procedimento può essere svolto con qualsiasi altro scalare reattivo, facendo però attenzione ad usare la relativa diffusività. La scelta di scalari differenti non comporta differenze nei risultati, in quanto è dimostrabile che in questo regime tutte le diffusività possono essere considerate uguali tra loro.

Formulazione per entrambi i regimi

I punti sperimentali esaminati sono numerosi e coprono un ampio spettro di condizioni all'interno dei due regimi trattati. Poiché spesso non è possibile determinare a priori il regime di combustione, che in alcuni casi si colloca nella zona di transizione, risulta opportuno definire un'unica formulazione in grado di modellare il processo sia nel regime di thin reaction zone che in quello corrugated. Per fare ciò, deve essere svolta un'analisi d'influenza volta a trovare i termini più determinanti nei due regimi. Il rapporto tra la velocità di combustione e velocità della turbolenza dell'ordine di Kolomogorv è un indicatore affidabile per questo scopo. Siccome è proporzionale al $Ka^{-\frac{1}{2}}$ è possibile soffermarsi semplicemente sul valore del Ka nel relativo regime. Il thin reaction zone è caratterizzato da $Ka > 1$ quindi $s_{L,s} < v$, pertanto è il fenomeno di diffusione e trasporto legato ai vortici turbolenti ad essere dominante. Viceversa, il $Ka < 1$ determina la condizione corrugated quindi la propagazione della fiamma è dovuta principalmente all'effetto della velocità laminare di combustione s_L^0 . Infine, osservando che in entrambi i regimi l'effetto della lunghezza di Markstein \mathcal{L} è trascurabile si giunge all'equazione cercata:

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla G = \rho s_L^0 |\nabla G| - \rho D \kappa |\nabla G| \quad (2.24)$$

Tutta l'equazione è stata moltiplicata per la densità, sia per consistenza con le altre equazioni di campo e sia perché è necessaria per svolgere la media di Favre. Anche questa equazione è valida esclusivamente sul bordo di fiamma $G(x,t) = G_0$. Introducendo la media di G nella posizione x all'istante t ($\bar{G}(x,t)$) e la sua varianza ($\overline{G'^2}(x,t)$), è possibile estendere il significato fisico di G equation al di fuori del fronte di fiamma. Lo scalare G può essere inteso come un valore fluttuante, che rappresenta la distanza tra il fronte di fiamma medio e il fronte istantaneo. Distanza perpendicolare scalare e misurata perpendicolarmente al fronte medio. Per dimostrarlo si può prendere ad esempio la seguente uguaglianza:

$$\bar{G}(x) - G_0 = x - x_f \quad (2.25)$$

In cui è stata scelta una dipendenza lineare di G rispetto x . x_f è la posizione media del fronte di fiamma ed è definita da $\bar{G}(x = x_f) = G_0$. Sostituendo nella (2.25) la definizione della fluttuazione, $G' = G - \bar{G}$, si giunge a:

$$G' = G - G_0 - (x - x_f) \quad (2.26)$$

Siccome G è univocamente definito solo sul fronte di fiamma, si impone $G = G_0$ arrivando alla relazione:

$$G' = -(x - x_f), \quad (2.27)$$

la quale mostra che la fluttuazione dello scalare G corrisponde ad una fluttuazione spaziale dello stesso rispetto il fronte di fiamma medio. Infine, è opportuno sottolineare il legame tra la varianza di G' e lo spessore di fiamma turbolento $l_{F,t}$:

$$\overline{(G'^2)} = \overline{(x - x_f)^2} = l_{F,t}^2 \quad (2.28)$$

Le equazioni ricavate finora non possono essere applicate tal quali per simulare numericamente la combustione, ma devono essere formulate in funzione della media di Favre così come le equazioni di bilancio. La media di Favre separa G e la velocità v in una somma di media (\sim) e fluttuazione ($''$):

$$G = \tilde{G} + G'', \quad v = \tilde{v} + v'' \quad (2.29)$$

Che se introdotte nella (2.23) porta all'equazione di G mediata con Favre:

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{G}}{\partial t} \right) + \bar{\rho} \tilde{v} \cdot \nabla \tilde{G} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{G}'') = (\rho s_L^0) \bar{\nabla} \tilde{G} - (\rho D) \bar{\kappa} \bar{\sigma} \quad (2.30)$$

In cui $\tilde{G} = \frac{\bar{\rho} G}{\bar{\rho}}$ rappresenta la media della distanza di G dal fronte di fiamma individuato da G_0 . Inoltre, è possibile ricavare anche l'equazione per la varianza \tilde{G}''^2 che a sua volta rappresenta lo spessore medio della fiamma turbolenta:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{G}''^2}{\partial t} \right) + \bar{\rho} \tilde{v} \cdot \nabla \tilde{G}''^2 + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{G}''^2) \\ = -2 \bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{G}'' \cdot \nabla \tilde{G} - \bar{\rho} \tilde{\omega} - \bar{\rho} \tilde{\chi} - (\rho D) \bar{\kappa} \bar{\nabla} \tilde{G} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Peters in Turbulent Combustion giunge a quest'ultima e ricava i modelli di chiusura dei termini $\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v}'' \tilde{G}'')$, $\tilde{\omega}$ e $\tilde{\chi}$ sorti dall'utilizzo di Favre, ricavando le equazioni definitive di \tilde{G} e \tilde{G}''^2 :

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{G}}{\partial t} \right) + \bar{\rho} \tilde{v} \cdot \nabla \tilde{G} = (\bar{\rho} s_t) |\nabla \tilde{G}| - \bar{\rho} D'_t \tilde{\kappa} |\nabla \tilde{G}|, \quad (2.32)$$

$$\bar{\rho} \left(\frac{\partial \tilde{G}''^2}{\partial t} \right) + \bar{\rho} \tilde{v} \cdot \nabla \tilde{G}''^2 = \nabla_{||} \cdot (\bar{\rho} D_t \nabla_{||} \tilde{G}''^2) + 2\bar{\rho} D_t (\nabla \tilde{G})^2 - c_s \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{\kappa}} \tilde{G}''^2 \quad (2.33)$$

Entrambe sono univocamente definite solo sul fronte di fiamma. Dove nella (2.32) $\tilde{\kappa}$ è la curvatura definita con \tilde{G} al posto di G. Questi termini stimano l'effetto di curvatura nella dinamica di propagazione. È opportuno precisare che la diffusività termica D'_t utilizzata nell'equazione (2.30) differisce da D_t nella (2.33), sebbene rappresentino la stessa grandezza fisica. Definite da Ewald e Peter [11], come:

$$D'_t = \sqrt{c_s \frac{k c_\mu}{2 Sc} \tilde{G}''^2}, \quad D_t = \frac{v_t}{Sc}. \quad (2.34)$$

Si noti la somiglianza tra la (2.32) e la (2.24) prestando attenzione alla velocità di fiamma che in questo caso è s_t^0 , ovvero la velocità di fiamma turbolenta, definita come la portata di massa che attraversa una fiamma turbolenta planare e stazionaria. Questa quantità dipende solo da quantità medie locali ed è definita attraverso correlazioni empiriche. La calibrazione di G-equation analizzata in questo lavoro è stata svolta proprio variando uno dei parametri della correlazione di s_t . A riguardo della (2.33) c_s è una costante pari a 2.0, $\tilde{\epsilon}$ e $\tilde{\kappa}$ sono rispettivamente energia cinetica e tasso di dissipazione media della turbolenza, $\nabla_{||}$ rappresenta che il gradiente è approssimato nella sola direzione tangenziale.

La (2.32) e la (2.33) sono le equazioni effettivamente utilizzate per simulare la combustione. In aggiunta, per evitare comportamenti non fisici, CONVERGE introduce la variabile C; quest'ultima, calcolata dall'equazione di trasporto:

$$\frac{\partial \rho \tilde{C}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \tilde{v}_i \tilde{C})}{\partial} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_t \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_i} \right) + \rho S, \quad (2.35)$$

la quale corregge localmente G e gestisce l'effettivo avanzamento della fiamma nell'ambiente di simulazione. È il termine S, dipendente dalla velocità turbolenta s_t e dalla lunghezza della scala turbolenta l_t , a legare C all'avanzamento della fiamma:

$$S = \frac{s_t}{\max \left[\frac{\Delta x}{2}, l_t \right]}, \quad l_t = \frac{3}{Pr} \frac{\mu_t}{\rho s_t} \quad (2.36)$$

Il valore di C è compreso tra zero e uno, C assume il valore nullo nelle celle caratterizzate da miscela incombusta e viceversa assume valore unitario laddove la combustione è completa; ovvero quando la reazione chimica ha completato la trasformazione dei reagenti in prodotti.

Nella Figura 3 è rappresentata l'evoluzione della variabile di progresso C per una miscela caratterizzata da $\phi = 0.8$, $x_{H_2} = 0.05$ e anticipo d'accensione di 55° prima del punto morto superiore (bTDC).

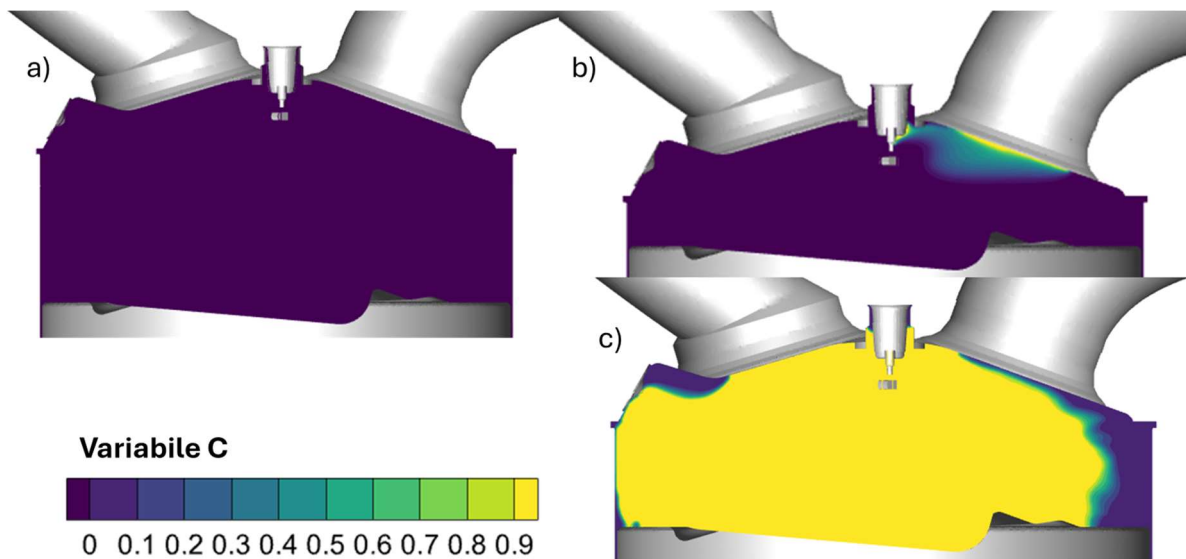


Figura 3 - Evoluzione della variabile di progresso nel caso T122. a) combustione assente, 56° bTDC; b) fase iniziale della combustione, 25° bTDC; c) combustione terminata, 40° aTDC.

2.4 Il modello di velocità turbolenta

La risoluzione delle equazioni di trasporto di G (2.32) e C (2.35) richiede che la velocità di combustione turbolenta s_t sia nota. La determinazione esatta di quest'ultima costituisce un problema tutt'ora irrisolto nell'ambito della combustione turbolenta premiscelata, e per far fronte a questo problema sono state sviluppate molteplici modelli. Damköhler attraverso la definizione della portata fu il primo a sviluppare un'espressione teorica per tale velocità. Dato che la velocità di combustione turbolenta è definita come la velocità con cui la fiamma consuma i reagenti, intuì che velocità laminare e turbolenta potessero essere legate dalla portata di massa dei reagenti. Infatti, data ρ_u densità della miscela incombusta, vale:

$$\rho_u s_L A_T = \dot{m} = \rho_u s_T A. \quad (2.37)$$

Dalla quale si giunge a:

$$\frac{s_L}{A} = \frac{s_T}{A_T}, \quad (2.38)$$

che formalizza il legame tra la cinematica locale sul fronte e la sua evoluzione globale. Sebbene la propagazione avvenga localmente a velocità laminare, le perturbazioni turbolente ne aumentano la superficie per unità di volume. L'ampiezza della superficie increspata è indicata con A_T . L'incremento dell'interfaccia tra reagenti e prodotti potenzia il tasso di consumo dei reagenti, manifestandosi come un'accelerazione del fronte globale A , che quindi propaga con **velocità di combustione turbolenta**. Inoltre, ricorrendo all'analogia geometrica della fiamma del becco Bunsen, ha correlato l'incremento dell'area superficiale del fronte di fiamma corrugato al rapporto tra la fluttuazione di velocità e la velocità di combustione laminare:

$$\frac{A_T}{A} \sim \frac{v'}{s_L}, \quad (2.39)$$

che unita alla (2.37) porta alla relazione:

$$v' \sim s_T, \quad (2.40)$$

sempre valida nel limite delle grandi turbolenze; ossia se il rapporto v'/s_L è elevato.

Peters [9] comprova che questa relazione generale è rispettata con G-equation, inoltre dimostra che il ∇G rappresenta il rapporto tra la superficie di fiamma A_T e l'area su cui

si sviluppa A. Con queste basi, nello specifico sviluppando l'equazione di trasporto di ∇G , ricava:

$$s_t = s_l + v' \left\{ -\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da + \left[\left(\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} Da \right)^2 + a_4 b_3^2 Da \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, \quad (2.41)$$

relazione della velocità di combustione turbolenta usata in questo lavoro. Inizialmente si noti che se $v' \rightarrow 0$ allora $s_t \rightarrow s_l$, prima conferma della validità della relazione. Inoltre, quest'ultima risulta particolarmente efficace nell'approssimare la velocità turbolenta su un ampio range del regime di combustione. Infatti, nel caso di turbolenza di grande scala ($l/l_f \rightarrow \infty$ o $Da \rightarrow \infty$), la velocità risulta indipendente dal numero di Damköhler. Al contrario, nell'intervallo di turbolenza di piccola scala ($l/l_f \rightarrow 0$ o $Da \rightarrow 0$), la velocità è proporzionale alla radice quadrata del numero di Damköhler. Inoltre, rispetta anche l'andamento del rapporto $(s_t - s_l)/v'$ in funzione di Da , notato sperimentalmente. Nella (2.41) Da è il numero adimensionale di Damköhler, a_4 e b_3 sono costanti definite attraverso la diffusività D e la diffusività turbolenta D_t . Il termine b_1 è anch'essa una costante, ma definita empiricamente per adattare la relazione ai dati sperimentali di velocità turbolenta. Di fatto è il parametro su cui è stata svolta la procedura iterativa per calibrare G-equation.

Pratica sperimentale

Nota la base teorica su cui verte l'attività svolta, è possibile spostare l'attenzione sulla parte pratica. Inizialmente è illustrato l'apparato sperimentale con cui è stata compiuta e analizzata la combustione della miscela di ammoniaca e idrogeno. Nella seconda parte è descritta la controparte digitale sviluppata per replicare numericamente i risultati ricavati dagli esperimenti reali.

3.1 Apparato sperimentale

I dati utilizzati per testare il modello G-Equation sono stati raccolti da Lhuillier et al. (2019) [6]. In figura è riportato lo schema rappresentativo del set up sperimentale.

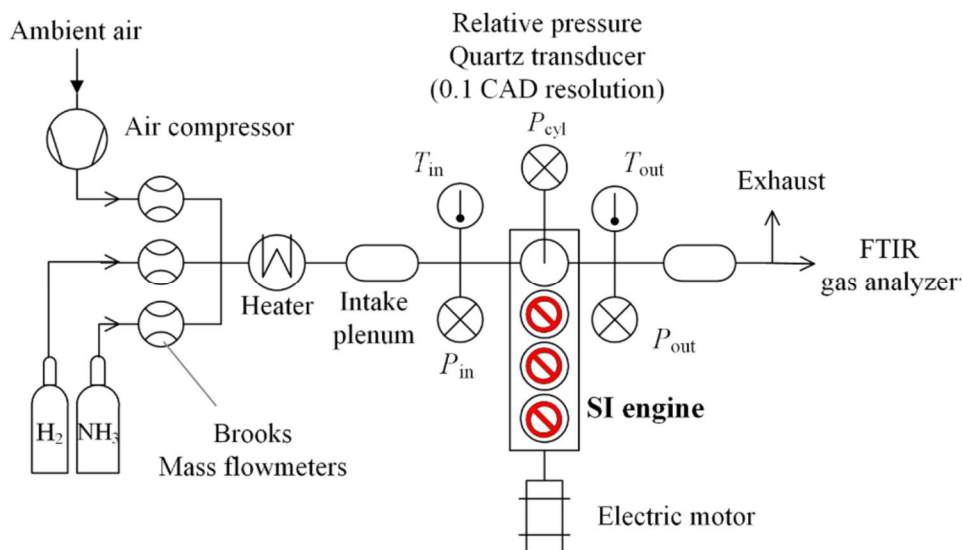


Figura 4 - Schema del set-up sperimentale.

La base di partenza è un moderno motore automobilistico ad accensione comandata (SI), di produzione industriale, quattro cilindri, approntato per gli esperimenti di laboratorio. La modifica principale è la disattivazione di tre cilindri, in quanto solo uno è stato alimentato dalla miscela combustibile. I moti turbolenti in camera sono stati garantiti dal rapporto di tumble pari a 2.4 e dalla geometria pent roof della testa. La Tabella 2 riassume le specifiche geometriche principali.

Tabella 2-Caratteristiche costruttive

Alesaggio	85.8 mm
Corsa	77 mm
Cilindrata	399.5 cm ³
Rapporto di compressione	10.5:1
Numero valvole	4

Per simulare il carico è stato utilizzato un motore elettrico che ha permesso di mantenere costante e pari a 1500 rpm la velocità di rotazione. Quest'ultima è stata verificata attraverso un encoder ottico, posto sull'albero a gomiti, caratterizzato da una risoluzione di 0.1 CAD. La temperatura del liquido refrigerante è stata misurata e mantenuta pari a 353 K. Le temperature e le pressioni in ingresso e uscita dalla camera di combustione sono state rilevate rispettivamente con termocoppie di tipo k e trasduttori di pressione piezoresistivi. La pressione interna nel cilindro è stata misurata con un trasduttore di pressione piezoelettrico, capace di misurare una differenza di pressione compresa 0 e 25 MPa con risoluzione di 0.1 CAD. Come riferimento del sensore per il calcolo della pressione assoluta è stata scelta la pressione media d'aspirazione 20 CAD dopo l'apertura delle valvole d'aspirazione. Il motore è stato alimentato separatamente da aria compressa secca, ammoniaca pura e idrogeno puro gassosi. Ogni flusso è stato monitorato separatamente, ognuno con un misuratore di portata massica termico con incertezza sullo zero del fondo scala dello 0,2% e precisione dello 0,7% sul valore di processo. Successivamente i tre gas sono stati preriscaldati alla temperatura di 323 K per poi mescolarsi nel plenum di aspirazione prima di raggiungere la camera di combustione. La candela originale è stata usata per innescare la combustione in camera. La strategia di accensione è stata finalizzata a massimizzare la pressione indicata media efficace netta ($IMEP_n$). Ciò ha comportato un progressivo incremento dell'anticipo in corrispondenza della riduzione di accendibilità e infiammabilità della miscela, ovvero in corrispondenza della riduzione del volume di idrogeno. Infine, allo scarico del motore è stato posto un misuratore Fourier Transform Infrared (FTIR) per analizzare la composizione dei gas combusti. L'indagine ha analizzato un ampio intervallo di rapporti di equivalenza (ϕ) e frazioni di idrogeno. Nello specifico, il rapporto ϕ è stato variato tra 0,6 e 0,8, mentre la quota di idrogeno ha coperto un campo tra lo 0% e il 60% in volume. Tale mappa sperimentale è stata indagata per due diverse condizioni di carico, corrispondenti a pressioni di aspirazione (p_{in}) di 0,8 bar e 1,2 bar.

Tuttavia, in questa analisi di G-equation sono stati simulati soli i punti relativi alla p_{in} di 1,2 bar. Infine, la variabilità ciclica e i parametri medi di riferimento sono stati determinati rispetto cento cicli motore. I risultati dell’esperimento, accuratamente discussi da Lhuillier [6], hanno dimostrato caratteristiche paragonabili agli attuali motori alimentati con combustibili tradizionali.

3.2 Controparte numerica

Il modello G-equation è stato implementato e testato in CONVERGE CFD, sviluppato dalla Convergent science, software che si fregia di capacità autonoma di affinamento del mesh. Il primo input necessario in un’analisi CFD è il dominio di simulazione. In CONVERGE la definizione di quest’ultimo avviene importando un modello CAD nell’ambiente di simulazione. In seguito, ogni parte che compone il modello deve essere distinta. In Figura 4 è visibile la suddivisione volta a distinguere le parti che fisicamente compongono la controparte reale. Ad esempio, si notano collettori, valvole e le ulteriori parti prossime alla camera di combustione. La suddivisione del modello è necessaria per svolgere il meshing variabile e per gestire le parti in movimento.

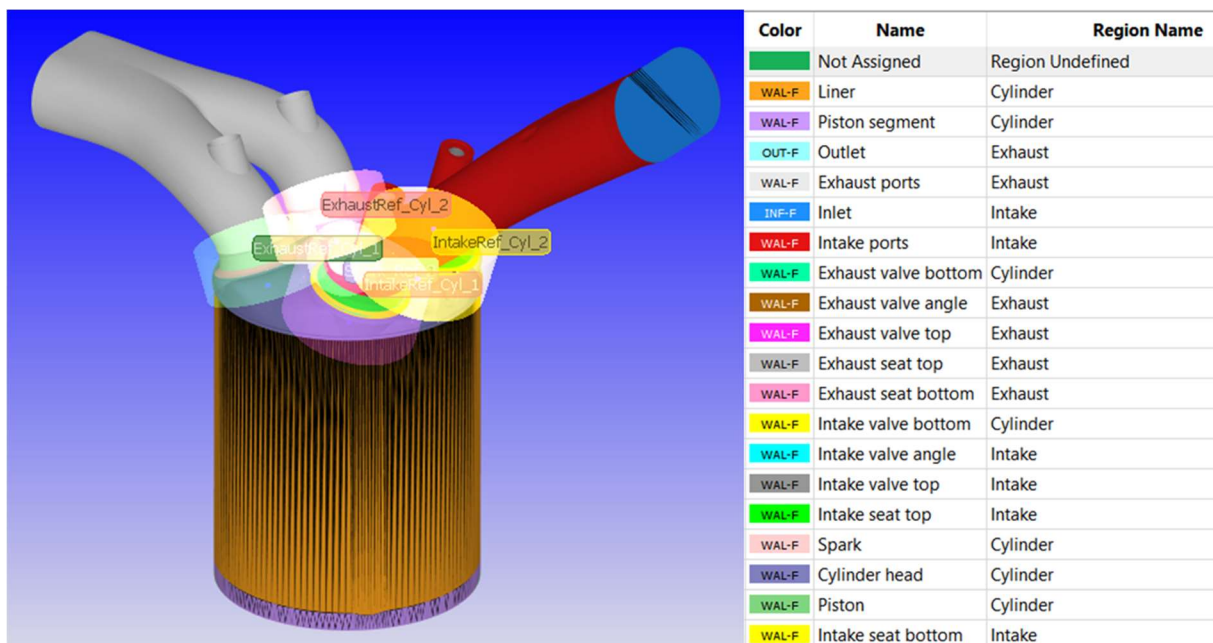


Figura 5 – Rappresentazione della suddivisione della camera di combustione. A destra è presente la legenda che associa il colore al rispettivo componente.

Successivamente, in base agli eventi caratteristici del fenomeno, il dominio deve essere diviso in regioni. In questo contesto le fasi di aspirazione, combustione e scarico sono

assegnate rispettivamente alle regioni intake, cylinder ed exhaust. Ad ogni regione devono essere assegnate le condizioni iniziali di bordo in termini di pressione e temperatura, così come la composizione della miscela di gas presenti nella regione e le condizioni di turbolenza e dissipazione. I valori assegnati sono stati ricavati dai dati di laboratorio. Quest'ultimi differiscono per ogni caso, eccetto per quanto riguarda turbolenza e dissipazione. Infatti, le caratteristiche di turbolenza sono state costanti nel corso di tutto l'esperimento.

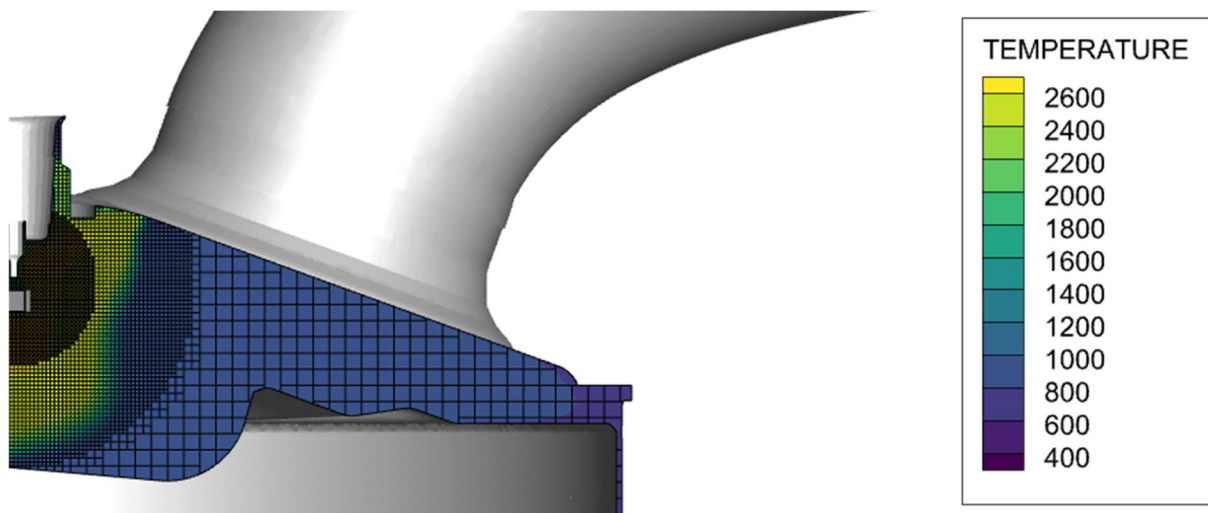


Figura 6 – Esempio di rappresentazione del dominio di temperatura [K]. È osservabile come varia la densità del mesh per effetto dell'AMR e del fixed embedding.

Il mesh del dominio è un elemento chiave nella simulazione perché determina la qualità dei risultati ottenuti. Una griglia di simulazione molto fitta garantisce risultati migliori, ma richiede potenze di calcolo elevate o tempi di computazione estremamente lunghi. Sono state adottate due strategie per ottimizzare il rapporto tra qualità dei risultati e tempi computazionali:

- **L' adaptive mesh refinement (AMR).** In corrispondenza dei punti in cui le variabili evolvono rapidamente CONVERGE infittisce la griglia di calcolo. L'utente deve specificare il massimo e il minimo numero di celle e indicare il periodo di attivazione. Si è deciso di attivare l'AMR in prossimità dell'intervallo di combustione, indicato in termini di posizione angolare. Nello specifico l'AMR si è attivato in corrispondenza di 5 CAD di anticipo rispetto l'accensione e 100 CAD dopo il punto morto superiore.

- Il **fixed embedding**. In corrispondenza di determinati punti importanti, come il punto d'innesco in questo modello, il mesh è più fitto rispetto la griglia circostante. Anche per questa strategia è necessario definire un intervallo di attivazione. È stato scelto un intervallo di 35 CAD, attivato con 5 CAD di anticipo rispetto l'accensione.

Il connubio di queste due strategie ha consentito di contenere i costi computazionali evitando di compromettere la qualità dei risultati. In quanto l'infittimento della griglia è stato applicato esclusivamente nelle regioni e negli istanti temporali in cui l'evoluzione rapida delle variabili richiedeva una maggiore risoluzione spaziale. Il dominio, una volta definito, deve essere caratterizzato mediante l'assegnazione delle proprietà dei fluidi coinvolti. Attraverso i file di input vengono definiti i parametri d'ingresso per ciascuna combinazione di ammoniaca e idrogeno sperimentata. Le specie coinvolte sono state indicate attraverso il file `species.in`. Le caratteristiche iniziali del dominio, ad esempio i campi di velocità e di concentrazione, sono state definite attraverso i file `map` che assegnano ad ogni cella il corrispondente valore.

L'ultimo passaggio è la definizione dei modelli fisico-chimici e dei loro parametri. Per simulare la turbolenza è stato scelto il modello standard RANS $k-\epsilon$ implementato in CONVERGE. L'innesco è stato modellato associando alle celle corrispondenti alla candela un'elevata quantità di energia in breve tempo; perciò, è stato impostato come periodo di attivazione un intervallo di 10 CAD. Il modello standard d'innesco associato al modello `G-equation-transport` dal solutore è stato adottato per simulare l'accensione. Le reazioni chimiche nella regione combusta e sul fronte di fiamma sono state risolte dal modello CEQ equilibrium solver. Un algoritmo sviluppato da Pope et al. [12] in grado di risolvere sempre gli equilibri chimici in problemi ben posti. La regione incombusta è considerata inerte prima di attraversare il fronte di fiamma; quindi, non richiede l'assegnazione di un modello chimico. Chiaramente come modello di combustione è stato utilizzato `G-equation`. CONVERGE ha a disposizione tre versioni del modello ed è stata scelta quella che il software chiama `G-equation-transport`. Quest'ultima traccia la posizione del fronte di fiamma, ne approssima la forma geometrica e contemporaneamente ne calcola lo spessore. Per raggiungere tale scopo risolve la (2.32), la (2.33) e la (2.35) illustrate nel [Capitolo 2](#). A valle della fase di setup

generale è stato possibile effettuare le simulazioni con il cluster d'ateneo. Un normale computer domestico non è in grado di svolgere i calcoli necessari in tempi ridotti; quindi, è necessaria questa rete di computer collegati in parallelo chiamata cluster. L'elaborazione completa di una simulazione, a cui corrispondono due cicli di combustione, ha richiesto dalle 15 alle 18 ore circa. In questa fase è stata svolta la calibrazione del modello in modo tale che le curve simulate di pressione e AHRR si avvicinassero il più possibile alle corrispettive curve medie sperimentali. Nello specifico sono stati regolati, per ogni caso sperimentale, la velocità di fiamma laminare s_L e il parametro b_1 dell'equazione (2.41), ovvero la correlazione di Peters per la determinazione della velocità di combustione turbolenta. Il valore di b_1 è stato modificato manualmente e costituisce l'unico parametro usato per la calibrazione. In quanto, la s_L dipende dalle caratteristiche chimiche del carburante ed è stata estratta da specifici file di input. Quest'ultimi sono file che contengono ognuno la velocità di fiamma laminare di una determinata combinazione di ammoniaca e idrogeno; pertanto, ciascuno è stato abbinato sistematicamente al relativo caso simulato.

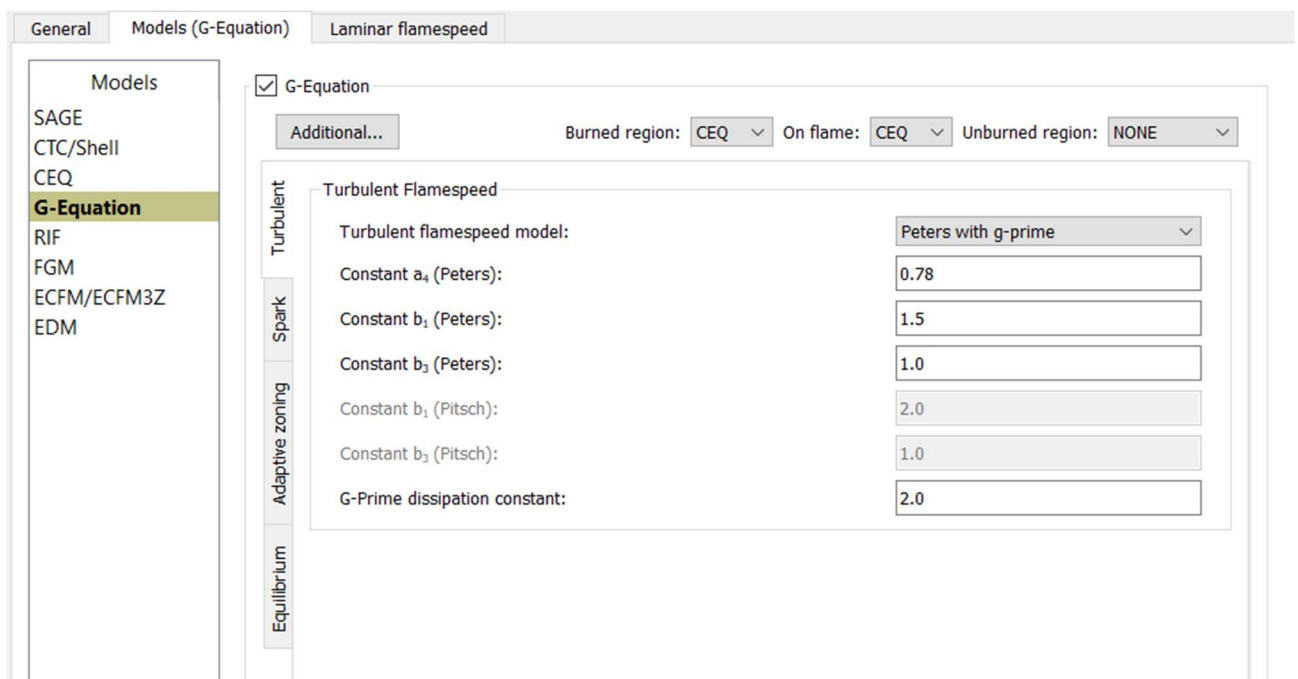


Figura 7 - Interfaccia di controllo del modello di combustione in CONVERGE

Risultati di simulazione

In questo capitolo sono presentati e discussi i risultati delle simulazioni effettuate. La loro validazione sarà svolta con l'ausilio delle curve di combustione sul diagramma di Borghi-Peters, inoltre sono confrontate le curve medie reali e numeriche delle seguenti grandezze di riferimento:

- pressione interna del cilindro;
- apparent heat release rate (AHRR);
- mass fraction burned (MFB).

I grafici di tutti i punti simulati sono riportati a fine capitolo per le tre tipologie di curve. In blu è rappresentata la curva media dei cicli di combustione reale e le curve grigie rappresentano i cento cicli di combustione con cui sono stati calcolati i valori medi. Le curve in rosso rappresentano i risultati dei due cicli simulati numericamente. L'AHRR numerico è calcolato da:

$$AHRR = \frac{dQ_a}{d\theta} = \frac{k}{k-1} p \frac{dV}{d\theta} + \frac{1}{k-1} V \frac{dp}{d\theta} \quad (3.1)$$

rappresenta l'energia ricavata dalla combustione al netto delle perdite verso le pareti della camera di combustione. L'esponente della trasformazione adiabatica k è stato calcolato dalla curva media sperimentale di AHRR. I valori di pressione e volume sono estratti direttamente dal software di calcolo. Il MFB è calcolato dal cumulative heat release (CHR) come segue:

$$CHR = \int_{\theta_{in}}^{\theta_{fin}} AHRR d\theta, \quad (3.2)$$

$$MFB(\theta) = \frac{CHR_{\theta}}{CHR_{Max}} \quad (3.3)$$

Infine, il comportamento del modello sarà valutato analizzando la variazione del parametro di calibrazione (b_1) in funzione del rapporto di equivalenza e della percentuale volumica d'idrogeno. In Tabella 3 sono riportati i casi sperimentali studiati,

ognuno è contraddistinto da un codice alfanumerico progressivo del tipo T123. Ogni cella rappresenta un punto sperimentale attraverso il suo codice e riporta il corrispondente risultato di calibrazione. La linea rossa rappresenta il **limite di stabilità** della fiamma, ovvero il limite oltre cui la combustione è incompleta o non si verifica. Le celle vuote nella zona di combustione corrispondono a combinazioni di ammoniaca e idrogeno che non sono state sperimentate.

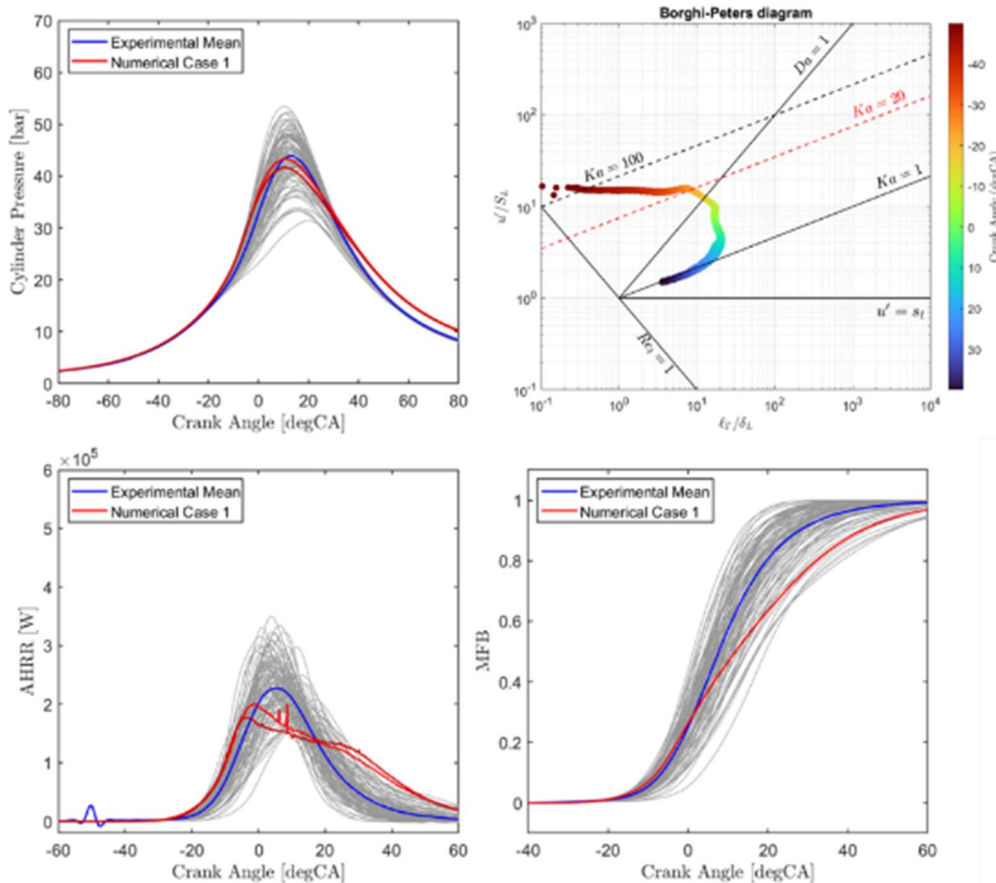


Figura 8 - Esempio di raffigurazione dei risultati ottenuti

Tabella 3 - Mappa dei punti sperimentali. Il codice identificativo del caso è riportato in grassetto seguito dal corrispettivo valore finale del parametro di calibrazione.

		Rapporto di equivalenza (ϕ)				
		$\phi=0,6$	$\phi=0,7$	$\phi=0,8$	$\phi=0,9$	$\phi=1$
Volume d' idrogeno (xH2)	xH2=0					T117 0,8
	xH2=0,05			T122 1,1	T123 1,1	T124 1,0
	xH2=0,10		T128 2,3	T129 1,5	T130 1,2	T131 1,0
	xH2=0,20	T134 1,3	T135 1,8	T136 1,2	T137 1,0	T138 1,0
	xH2=0,40	T141 1,9		T143 1,1		T145 1,2
	xH2=0,60	T148 1,4		T150 1,3		T152 1,3

4.1 Analisi dei risultati

Dall'analisi dei grafici riportati nelle figure successive emerge un ottimo accordo tra i profili di pressione simulati e la curva media sperimentale. Tenzialmente le tracce numeriche e simulate sono sovrapposte ed eventuali scostamenti sono ridotti e circoscritti alla fase finale della combustione; inoltre, i risultati numerici si mantengono sempre nell'intervallo di variabilità ciclica sperimentale. Si consultino i grafici del paragrafo '[Rassegna dei casi sperimentali](#)' per costatare le affermazioni sugli intervalli di variabilità ciclica.

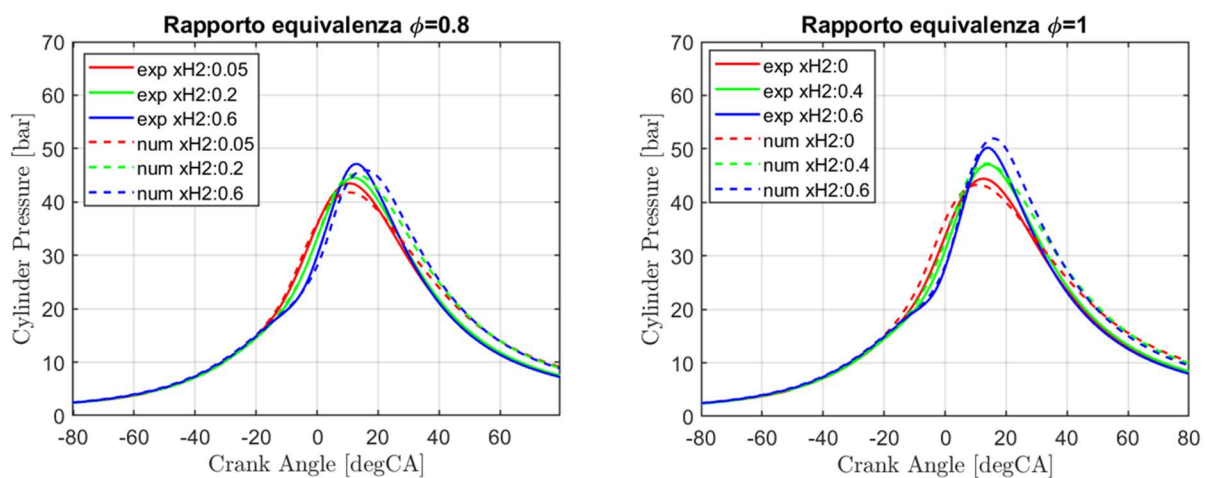


Figura 9 - Confronto delle curve di pressione a parità di rapporto di equivalenza. Linea continua: casi sperimentali. Linea tratteggiata: casi numerici

In Figura 9 sono rappresentate le variazioni delle curve di pressione rispetto la frazione volumica di idrogeno (xH_2) per due differenti rapporti di equivalenza (ϕ). All'aumentare della frazione volumica di idrogeno, si osserva un incremento della pressione massima raggiunta durante la combustione. Contestualmente, il profilo di pressione risulta più ristretto, indicando che il processo di combustione si completa in un intervallo di tempo inferiore. Tale comportamento è attribuibile all'aumento della velocità di fiamma laminare associato alla maggiore reattività della miscela, incremento giustificato dall'aumento della frazione d'idrogeno. In entrambi i casi, $\phi=0.8$ e $\phi=1$, lo scostamento tra curva sperimentale e la corrispettiva numerica non varia significativamente al variare di xH_2 . Inoltre, come si può osservare dalla figura successiva, anche al variare di ϕ a parità di xH_2 la differenza tra curva sperimentale e numerica non varia significativamente.

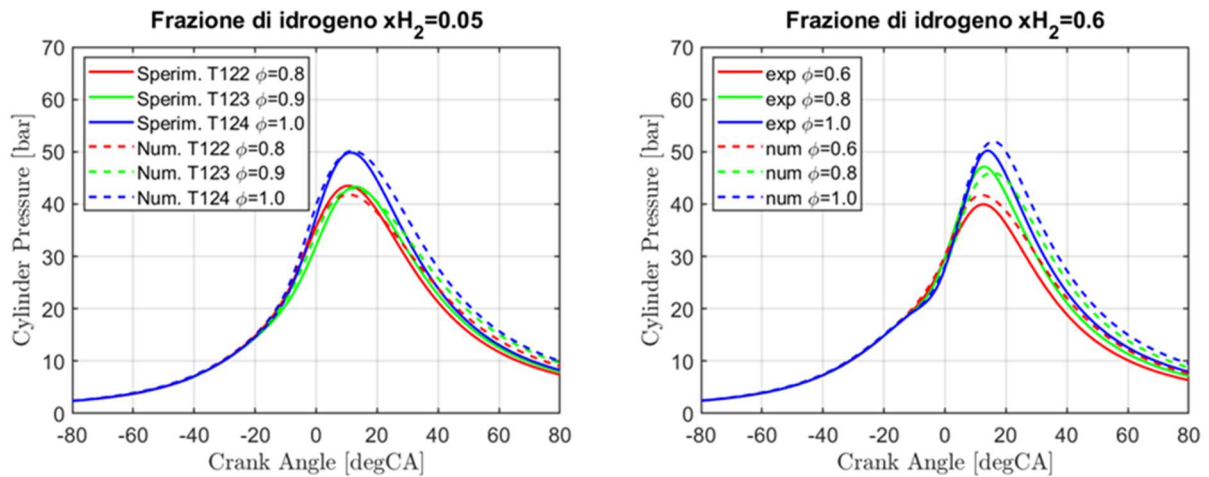


Figura 10 - Confronto delle curve di pressione a parità di volume d'idrogeno

Tali evidenze dimostrano la capacità del modello G-equation di riprodurre correttamente l'evoluzione della pressione per miscele di ammoniaca e idrogeno su quasi tutto l'intervallo di studio; infatti, esclusivamente il [caso T134](#) ha fornito risultati numerici deludenti. I profili simulati e la curva media sperimentale dell'AHRR presentano scostamenti maggiori rispetto alle curve di pressione. Nello specifico, per i casi compresi tra T117 e T128, caratterizzati dal volume d'idrogeno inferiore al 10%, il picco simulato risulta inferiore al picco medio come nelle curve rosse in Figura 11. Tale evidenza suggerisce che in questi casi il calore rilasciato è sottostimato. Tuttavia, nei casi successivi si osserva che tale scostamento si riduce come nelle curve verdi. Invece, per i casi da T136 in poi, il calore rilasciato è sovrastimato come nelle curve blu; in quanto, almeno uno tra il picco o il ramo discendente della curva numerica superano la controparte sperimentale.

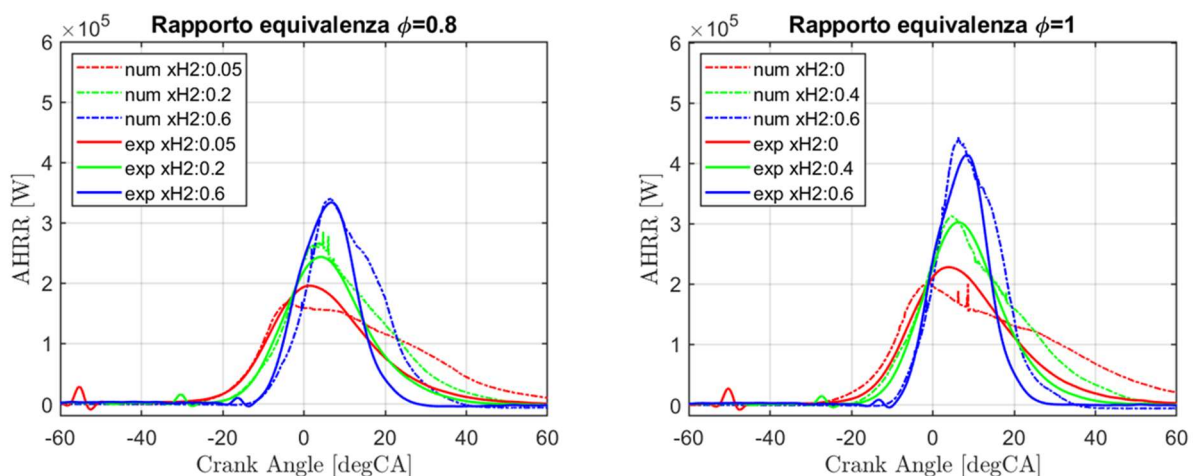


Figura 11 - Confronto delle curve di AHRR a parità di rapporto di equivalenza

Quanto visto può essere ricondotto all'interazione fiamma-parete, poiché il modello G-equation non include questo fenomeno. Al fine di migliorarne le capacità predittive nelle fasi finali della combustione è necessario incorporare un modello dedicato a tale fenomeno, ciò comporterebbe un miglioramento nella qualità della predizione come dimostrato da Jisoo Shin et al. [13]. La variazione del rapporto di equivalenza non è significativa sulla differenza tra AHRR numerico e simulato, come si può osservare in Figura 12. Infatti, con $xH_2 = 0.05$, grafico a), le curve numeriche sottostimano sempre il riferimento sperimentale; invece, con $xH_2 = 0.6$, grafico b), i risultati numerici sovrastimano sempre la controparte sperimentale. Quanto visto suggerisce che la causa principale della variazione dello scostamento tra curva numerica e simulata sia la variazione del volume d'idrogeno.

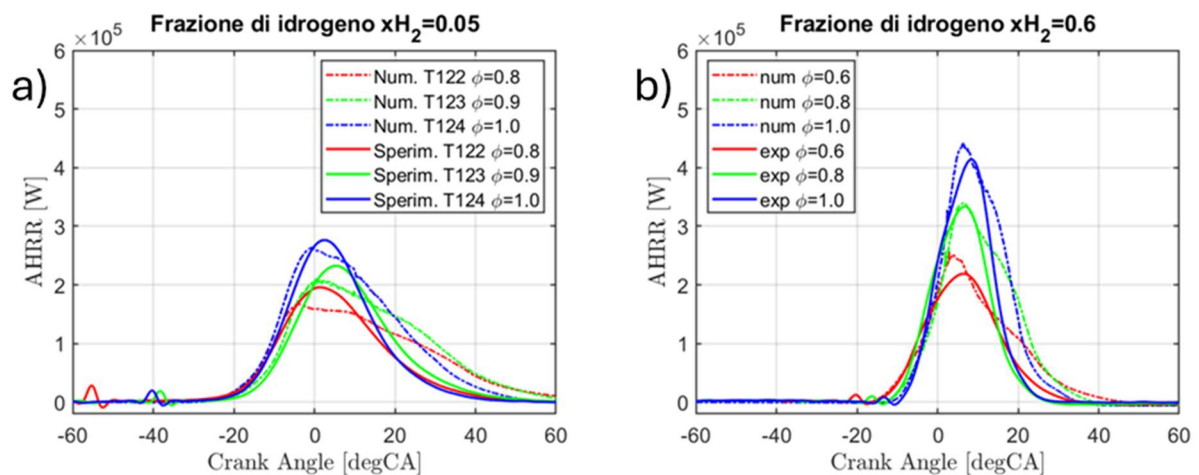


Figura 12 - Confronto delle curve di AHRR a parità di volume d'idrogeno

In ogni caso, i risultati numerici rientrano nell'intervallo di variabilità ciclica sperimentale, confermando ulteriormente l'affidabilità del modello. Contrariamente alle curve precedenti, i risultati di simulazione delle curve di MFB non sono altrettanto accurati. Nella maggior parte dei casi la pendenza della curva simulata è notevolmente minore rispetto la curva media e in alcuni casi presenta un off-set di valore positivo, come in Figura 13. Nella prima metà di combustione, ovvero fino al MFB50, la differenza è ridotta e difficilmente supera 5 degCA. Invece, la differenza diventa significativa per il MFB90, raggiungendo valori nell'intorno di 10 degCA nei casi con bassa reattività. Infine, si osserva che l'incremento della velocità di combustione determini la riduzione progressiva dello scostamento tra le curve sperimentali e numeriche.

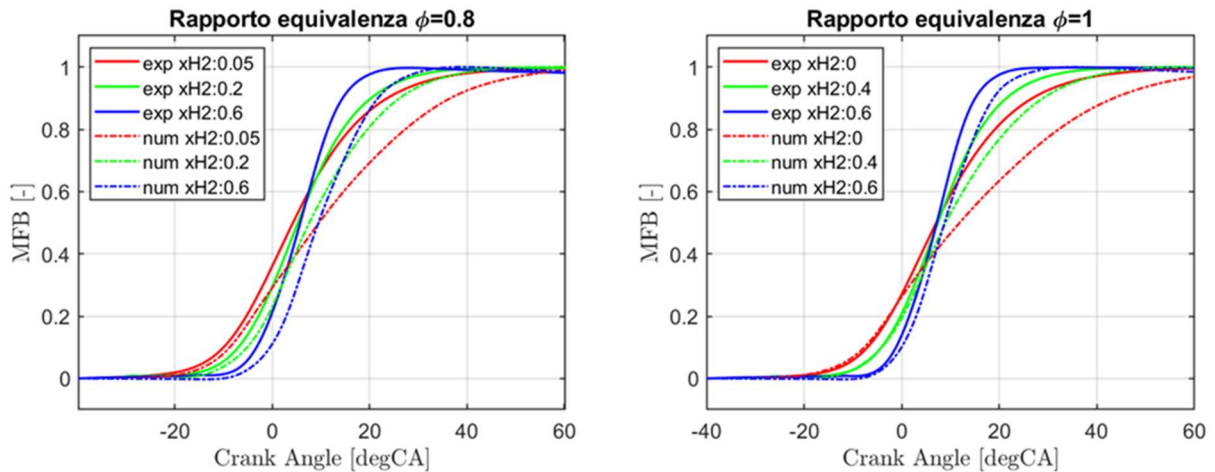


Figura 13 - Confronto delle curve di MFB a parità di rapporto di equivalenza

Quanto visto fa supporre che la combustione simulata progredisca più lentamente rispetto al caso reale e talvolta in ritardo. Inoltre, nei casi caratterizzati da una ridotta reattività, la curva simulata di MFB si pone sul limite dell'intervallo di variabilità ciclica; di conseguenza, è caratterizzata da un errore di stima non trascurabile. Infine, si osservi come l'effetto di ϕ sulla riduzione dello scostamento sia meno marcato rispetto all'effetto del xH_2 ; ad ulteriore conferma che sia l'incremento della velocità di combustione a determinare la riduzione progressiva dello scostamento tra le curve sperimentali e numeriche. A questo punto mostrate le imprecisioni, si può affermare che eventuali considerazioni predittive, tratte dalle curve simulate di MFB, presentino dei **limiti di affidabilità**; in particolare, in regimi operativi caratterizzati dal volume d'idrogeno ridotto. Dai grafici in Figura 13 si nota che la pendenza delle curve di MFB aumenta proporzionalmente al volume d'idrogeno, determinando una riduzione della **durata angolare** della combustione. Quanto visto è dovuto all'aumento della velocità del fronte di fiamma che comporta una riduzione della scala temporale della reazione. Tale fenomeno limita l'interazione tra i vortici turbolenti e la struttura interna della fiamma, favorendo il passaggio dal regime di **Thin Reaction Zone** a quello di **Corrugated Flamelet**. L'assottigliamento del fronte di fiamma, dovuto a s_L più elevate, sposta la combustione verso regimi a minor numero di Karlovitz. Questa tendenza è riscontrata nei diagrammi di **Borghi-Peters** simulati, visibili in Figura 15. Inoltre, sempre in Figura 15 è possibile notare come la frazione di idrogeno influenzi maggiormente il regime di combustione rispetto al rapporto di equivalenza.

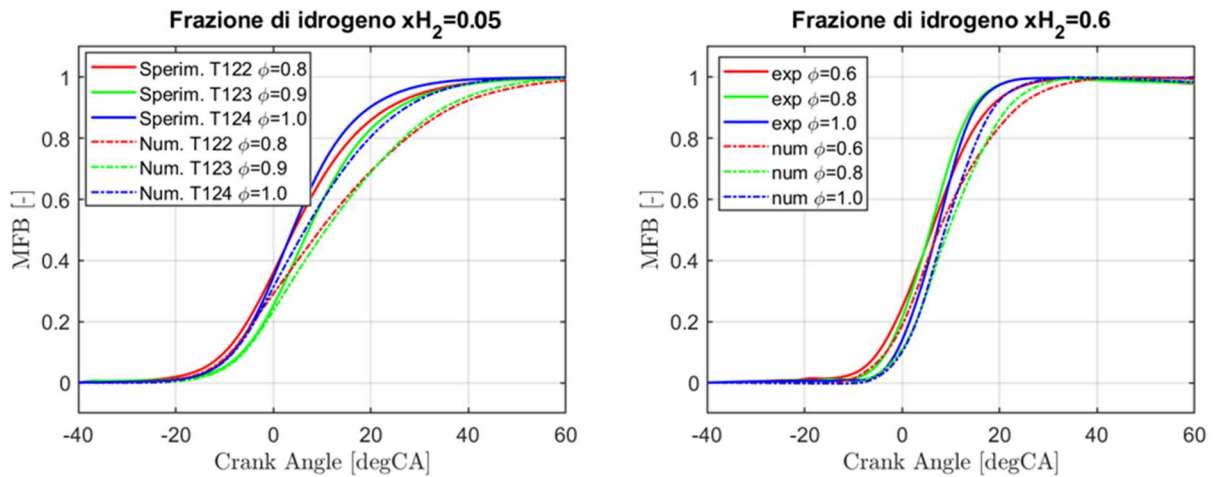


Figura 14 - Confronto delle curve di MFB a parità di volume d'idrogeno

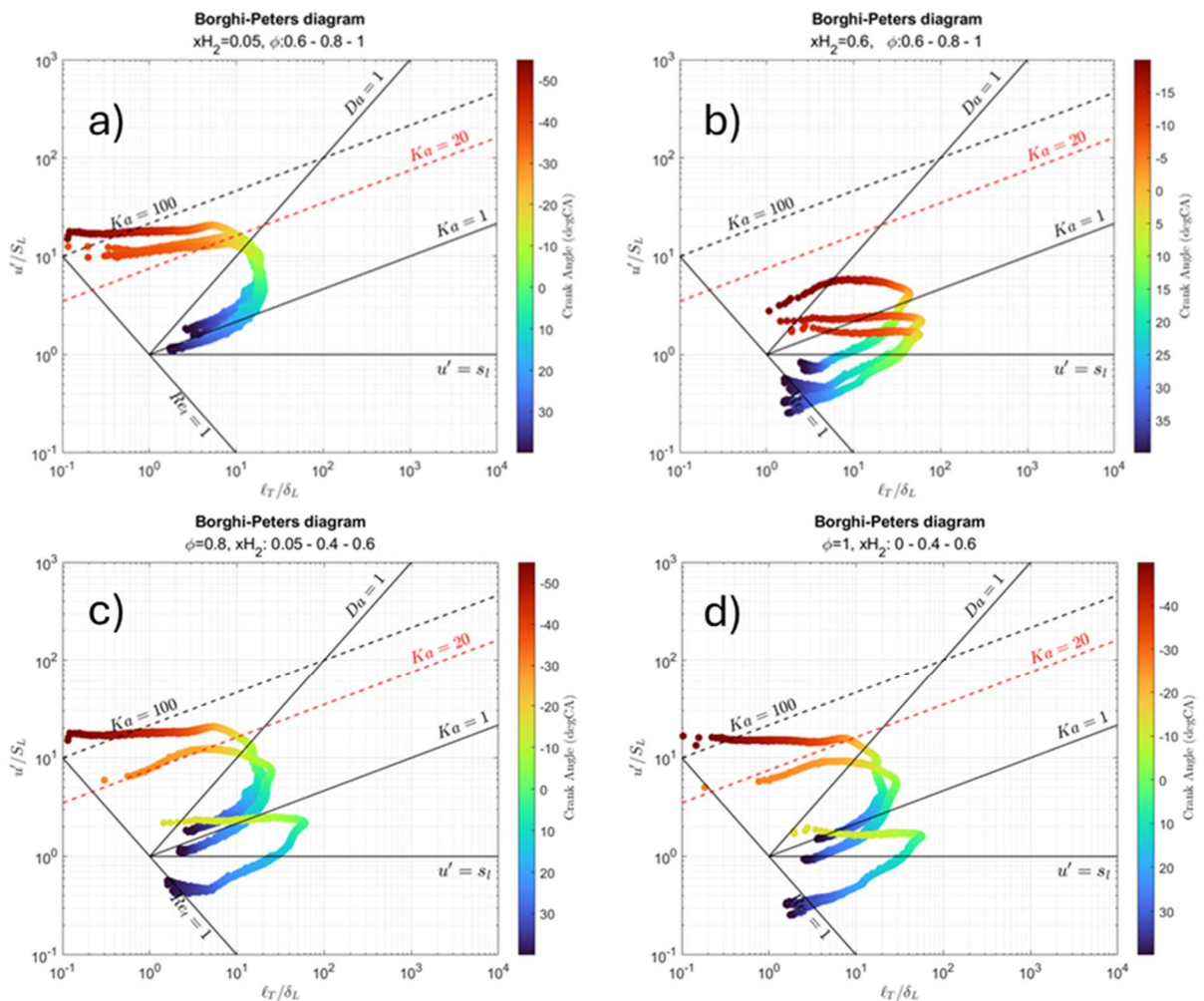


Figura 15 - Si osservi come le curve siano più raggruppate in corrispondenza di xH_2 costante, diagrammi a) e b), suggerendo minore sensibilità della combustione alla variazione del rapporto di equivalenza. I diagrammi c) e d) mostrano l'ampia variazione di regime, da thin reaction zone a flamelets, all'aumentare del volume d'idrogeno e a parità di rapporto di equivalenza.

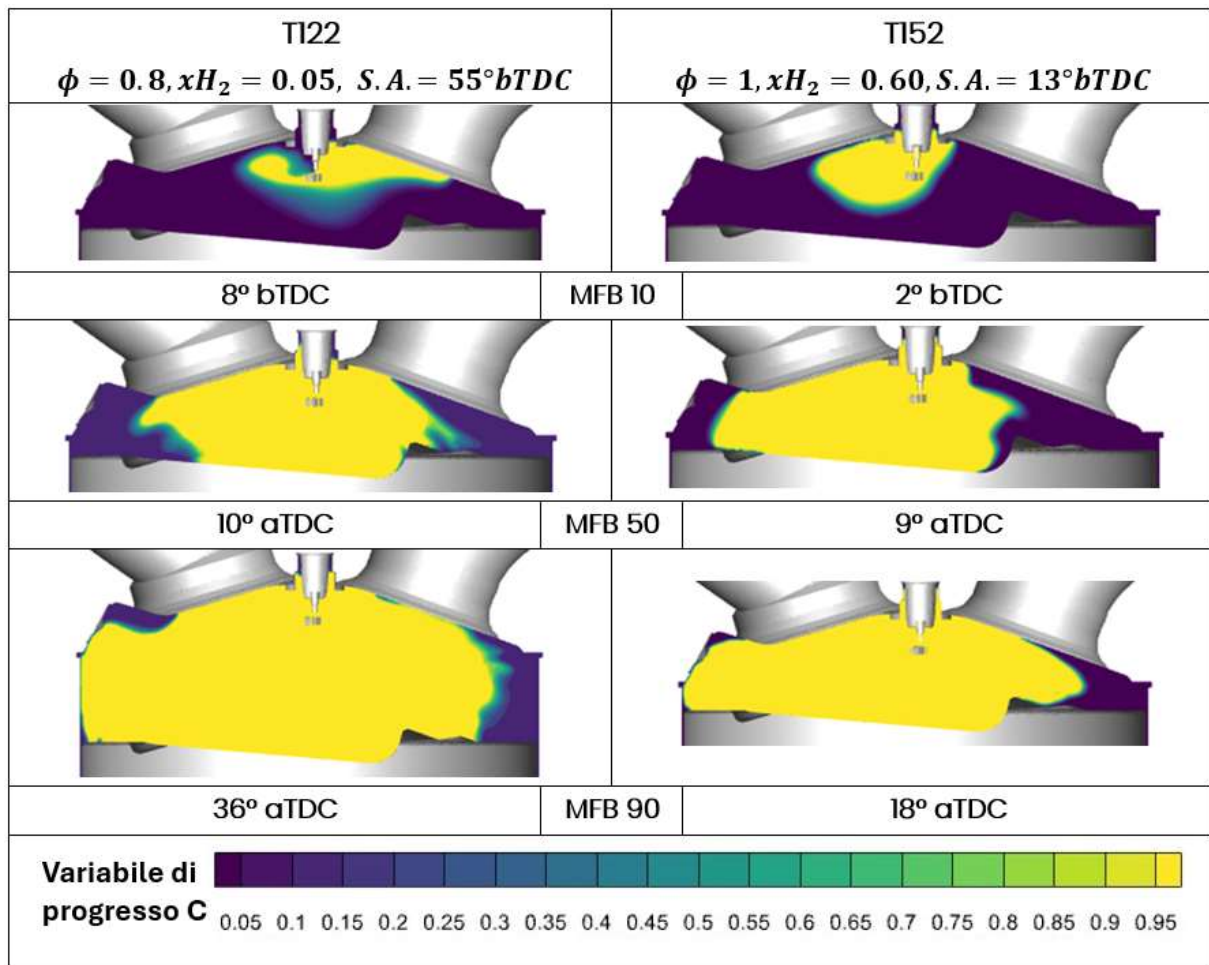


Figura 16 - Evoluzione del fronte di fiamma visualizzata dalla rappresentazione del campo della variabile di progresso C. L'angolo relativo al MFB è estratto dai risultati numerici di simulazione.

In figura 16 è rappresentata l'evoluzione del campo della variabile di progresso C in tre istanti temporali di riferimento per i casi T122 e T152. Il caso T122 è caratterizzato da un regime di combustione di tipo thin reaction zone, nel quale il fronte di fiamma risulta inspessito a causa della penetrazione delle strutture turbolente nella zona di preriscaldamento. Il caso T152 appartiene invece al regime flamelet, in cui il fronte di fiamma è sottile e risulta esclusivamente deformato dalla turbolenza, senza che questa ne alteri la struttura interna. Nel caso T122 (a sinistra) la transizione della variabile di progresso da 0 a 1 avviene in modo graduale, su uno spessore spaziale più esteso, mentre nel caso T152 tale transizione è considerevolmente più rapida e confinata in uno strato di spessore ridotto. L'analisi del caso T122 consente di apprezzare il processo di decadimento della turbolenza dalla scala integrale fino alla scala di Kolmogorov,

evidenziato dalla progressiva riduzione dello spessore del fronte di fiamma nel quale le strutture turbolente vengono inglobate.

Alla luce dei risultati ottenuti dalle curve di pressione, di MFB e di AHRR, si può affermare che il modello è in grado di fornire una stima accettabile delle caratteristiche di combustione.

4.2 Analisi della variabilità del parametro di calibrazione

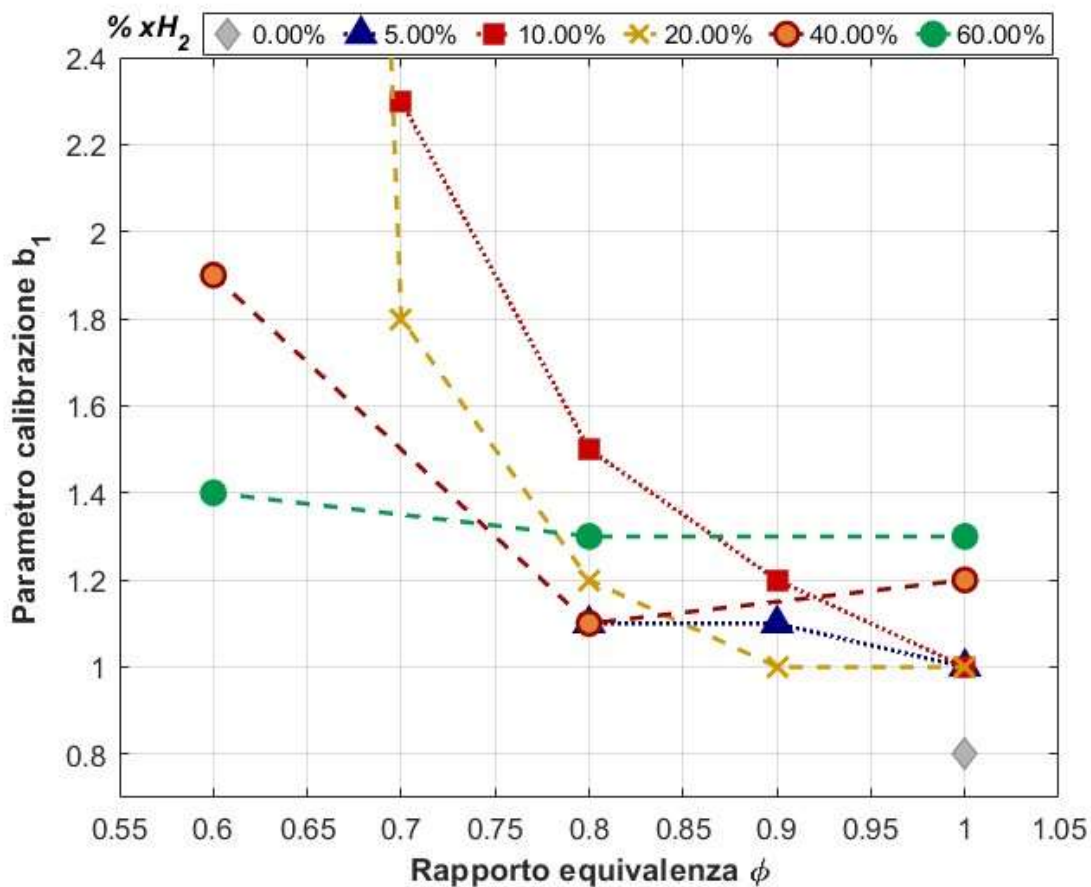


Figura 17 - Variazione del parametro di calibrazione in funzione rapporto di equivalenza. Ad ogni curva corrisponde xH_2 costante.

La Figura 17 illustra i parametri di calibrazione adottati per ottimizzare la congruenza tra curve numeriche e sperimentali. I profili riportati mostrano l'andamento del coefficiente b_1 in funzione del rapporto di equivalenza (ϕ) per diverse frazioni volumetriche di idrogeno, evidenziando una **correlazione inversa non lineare**. In corrispondenza di ϕ pari a 0,8, si osserva una netta variazione dell'andamento dei profili, oltre la quale la sensibilità di b_1 rispetto al rapporto di equivalenza diminuisce drasticamente. In tale

regione si rileva, inoltre, una significativa **inversione della tendenza di calibrazione**: per rapporti di equivalenza inferiori a 0,8, il contenuto di idrogeno e il parametro b_1 risultano inversamente proporzionali; viceversa, superata tale soglia, il trend tende a invertirsi. L'incremento della frazione di idrogeno agisce dunque come fattore di stabilizzazione, attenuando la dipendenza di b_1 da ϕ , specialmente nei regimi prossimi allo stechiometrico. Tale comportamento conferma come il modello **G-equation**, basato sulla formulazione di Peters per la velocità di combustione turbolenta, presenti maggiori limiti di accuratezza in regimi caratterizzati da ridotte velocità di fiamma. A supporto di questa evidenza, si confronti la stabilità della curva relativa alla massima frazione di idrogeno (curva verde), la cui variazione complessiva risulta inferiore all'8%, con il profilo relativo al 20% d'idrogeno (curva gialla), che registra invece uno scostamento superiore al 92%. In aggiunta a quanto detto, si noti che il primo punto della curva gialla è fuori scala di calibrazione ed assume il valore $b_1=13$. Tale punto corrisponde al caso **T134** ($\phi=0.6$ e $x_{H_2}=0.20$) il quale si colloca sul **limite di stabilità della fiamma**. Tale condizione, caratterizzata da una **ridotta reattività** della miscela, rappresenta una condizione critica per il sostentamento della combustione; ciò giustifica l'estrema difficoltà del modello nel rappresentare correttamente la propagazione del fronte di fiamma in questo scenario. Questo aspetto è approfondito nel paragrafo [Caso T134](#). In conclusione, per condizioni operative con $\phi > 0,8$, la procedura di calibrazione potrebbe essere semplificata adottando un valore di b_1 costante per ogni specifica frazione di idrogeno, data la ridotta sensibilità del modello in tale intervallo; contrariamente, per $\phi < 0,8$ è necessaria una calibrazione puntuale.

4.3 Rassegna completa dei casi in esame

Di seguito sono riportati i grafici di pressione, AHRR, MFB e di Borghi-Peters per ogni punto sperimentale riportato in [Tabella 3](#). Per agevolare la consultazione, i casi sono esposti in ordine crescente di codice identificativo. Inoltre, per completezza sono specificati il parametro di calibrazione e l'anticipo di accensione.

Caso T117

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno x_{H_2} [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
1	0.0	0.8	-50

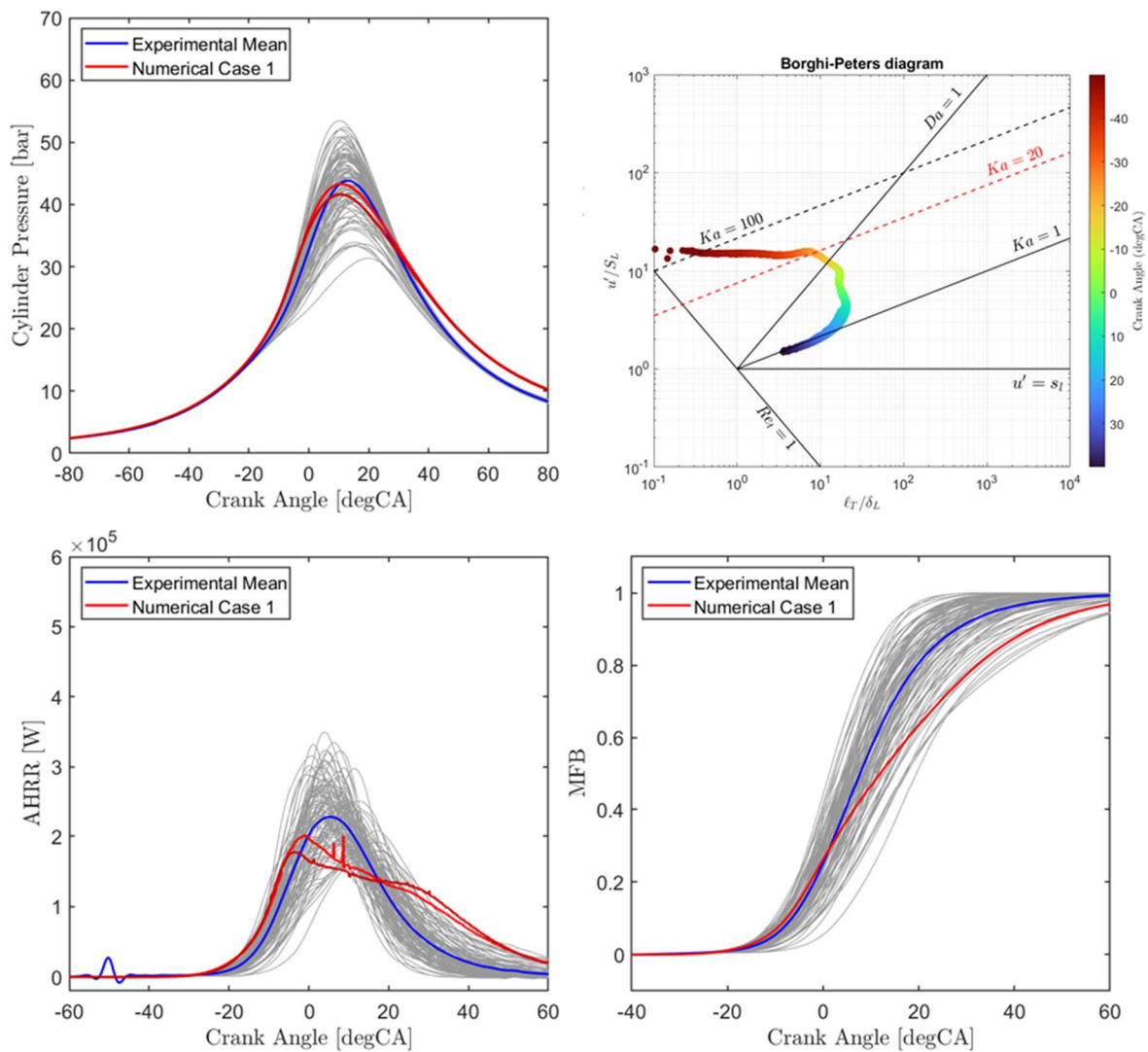


Figura 18 - Curve di pressione, AHRR, MFB e diagramma di Borghi-Peters relativi al caso T117

Caso T122

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.8	0.05	1.1	-55

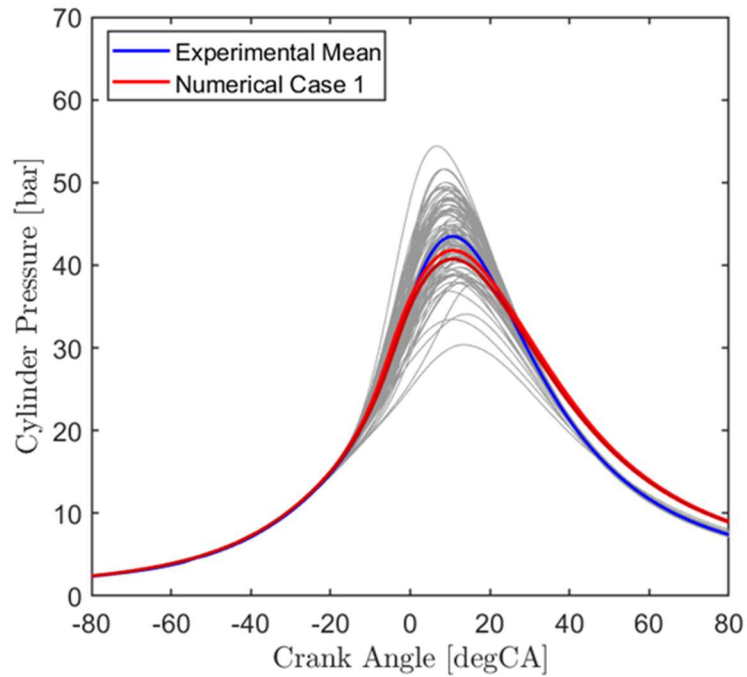


Figura 19 - Curva di pressione caso T122

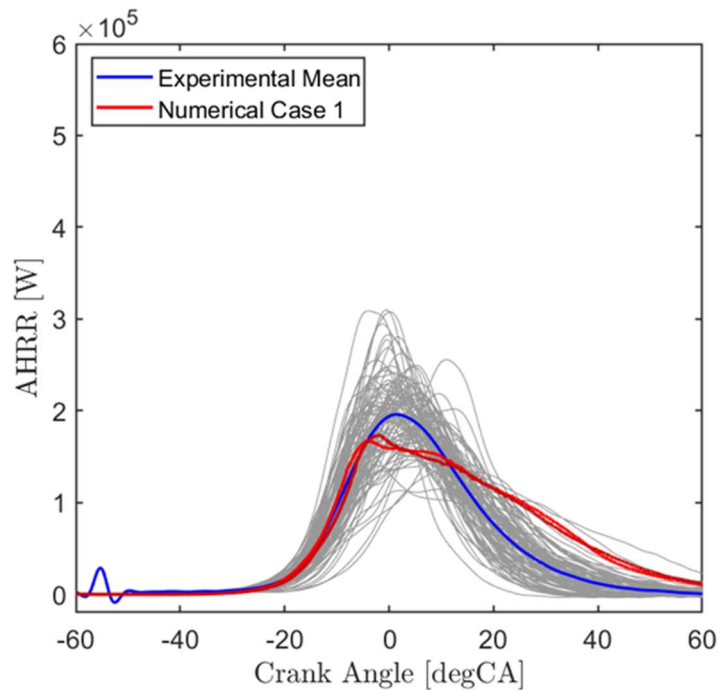


Figura 20 - Curva AHRR caso T122

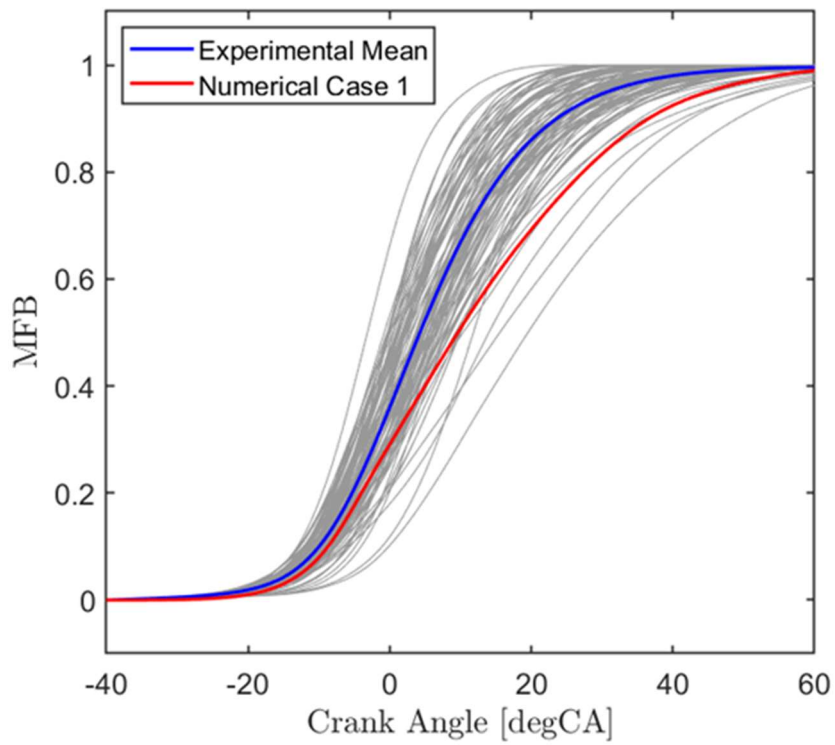


Figura 21 - Curva MFB caso T122

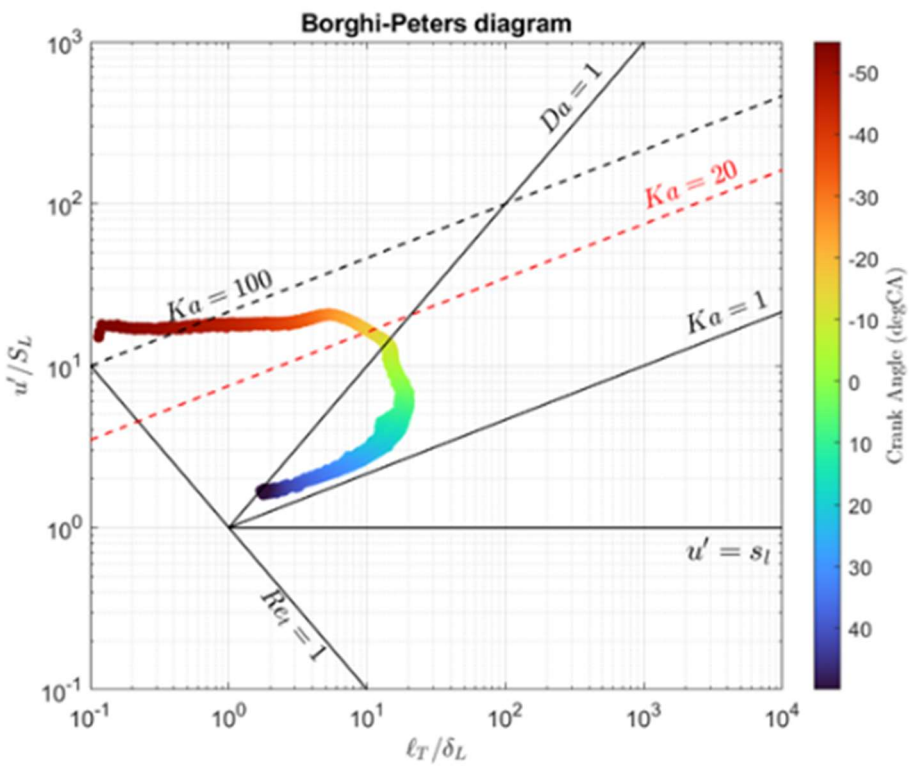


Figura 22 - Grafico combustione di Borghi-Peters caso T122

Caso T123

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.9	0.05	1.1	-38

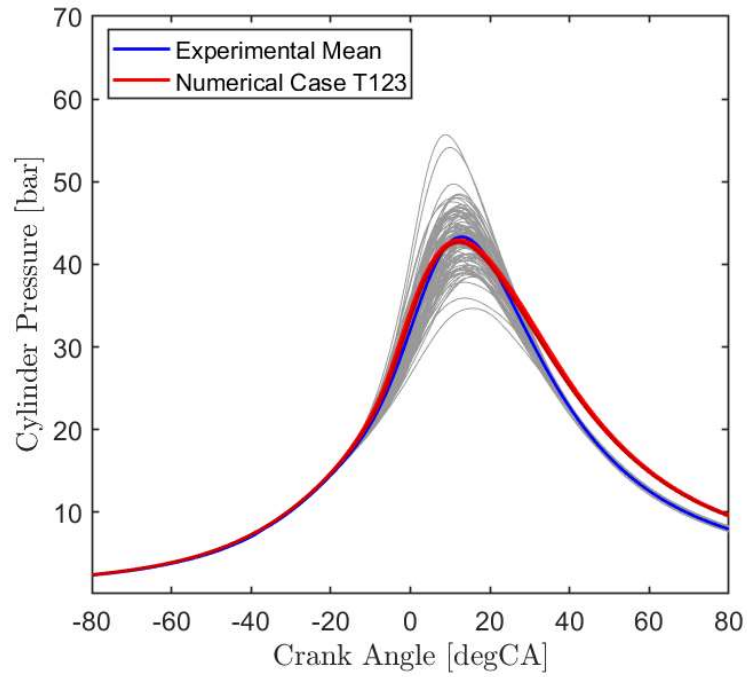


Figura 23 - Curva di pressione caso T123

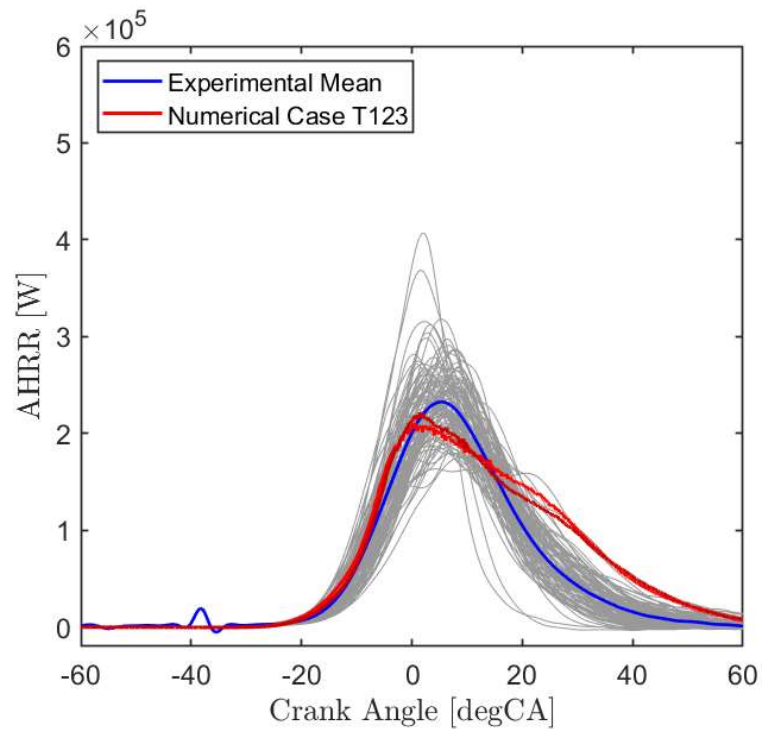


Figura 24 - Curva AHRR caso T123

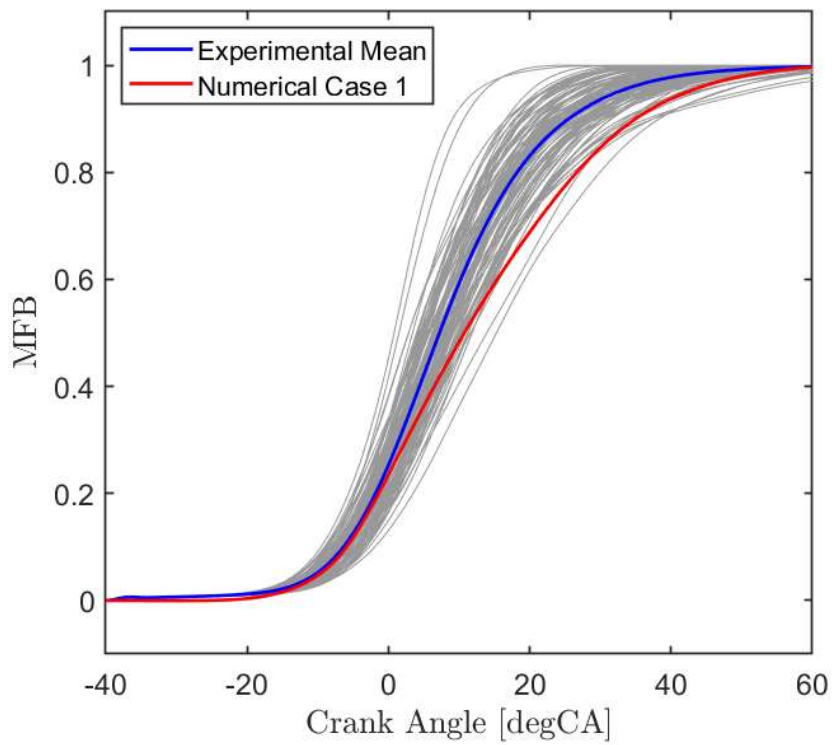


Figura 25 - Curva MFB caso T123

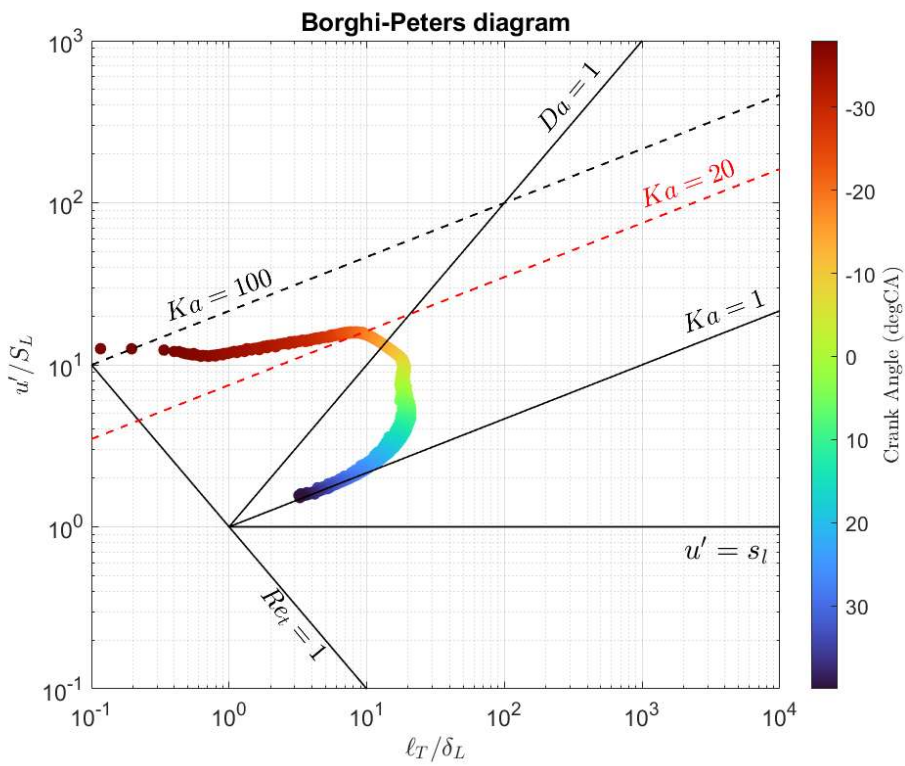


Figura 26 - Diagramma Borghi-Peters caso T123

Caso T124

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [$^{\circ}$ CA]
1	0.05	1	-40

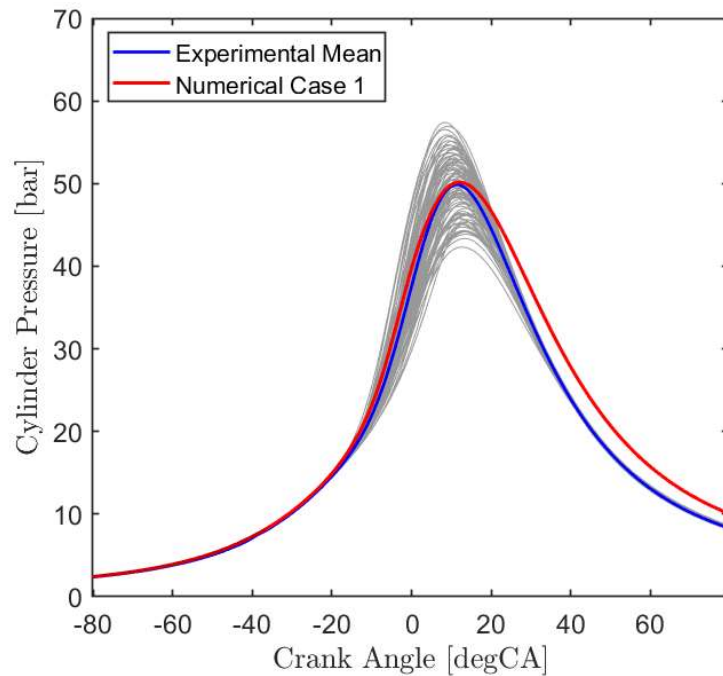


Figura 27 - Curva di pressione caso T124

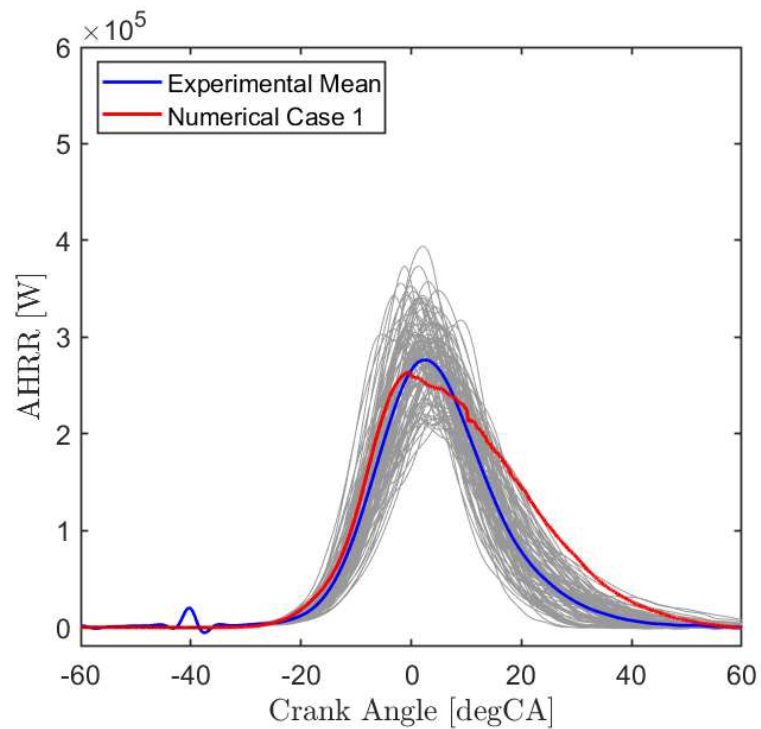


Figura 28 - Curva AHRR caso T124

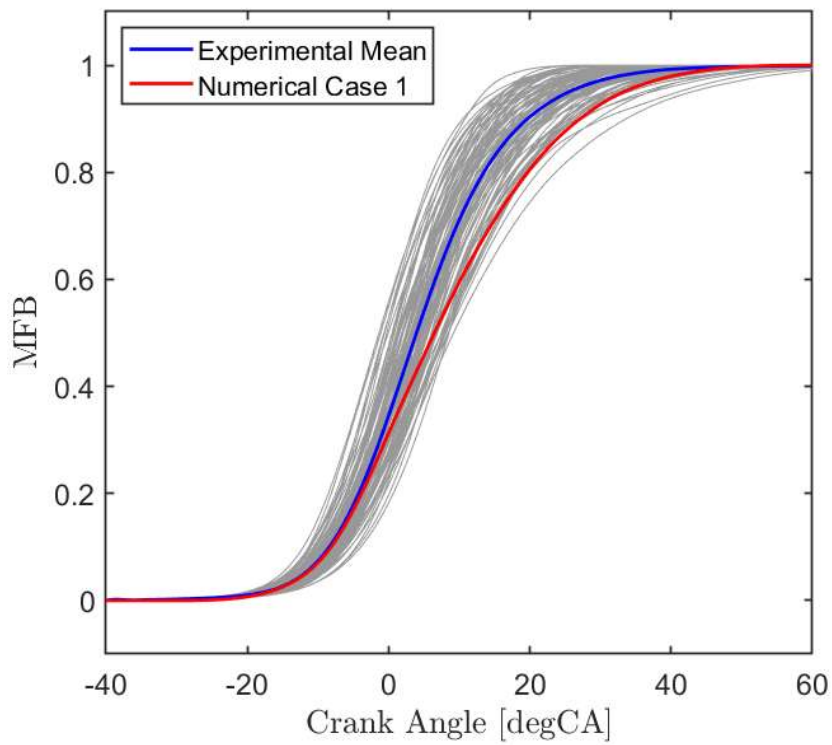


Figura 29 - Curva MFB caso T124

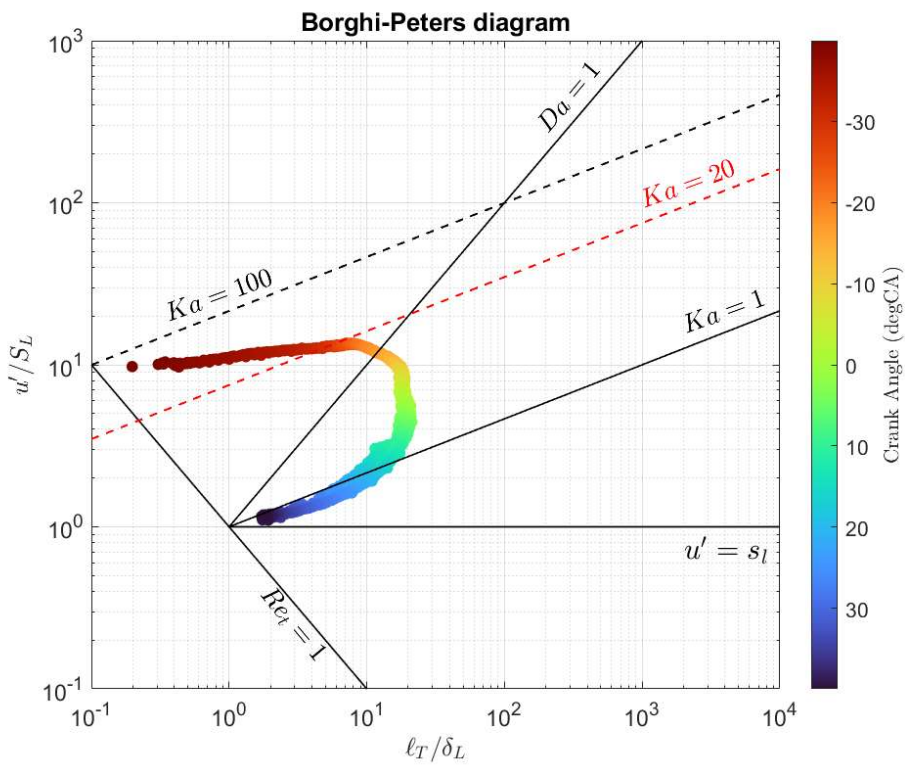


Figura 30 - Diagramma Borghi-Peters caso T124

Caso T128

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.7	0.10	2.3	-55

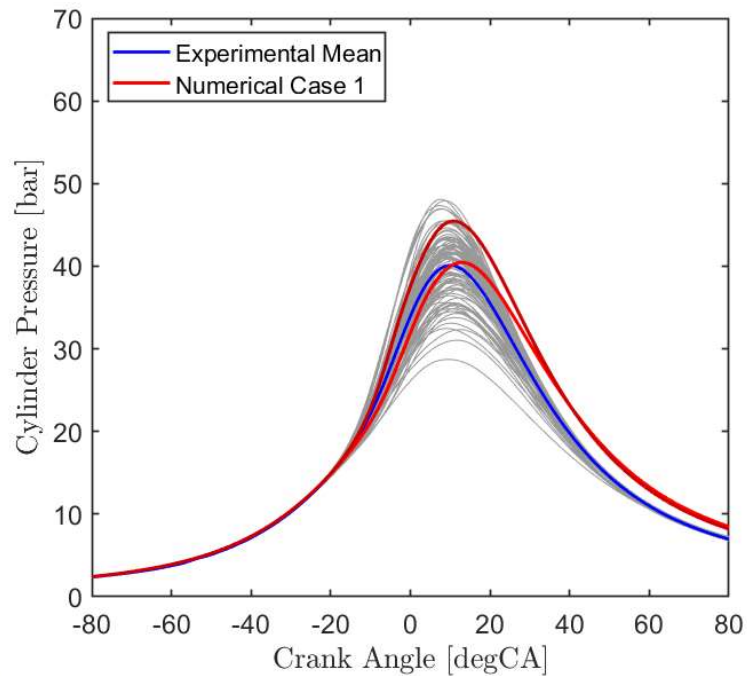


Figura 31 - Curva di pressione caso T128

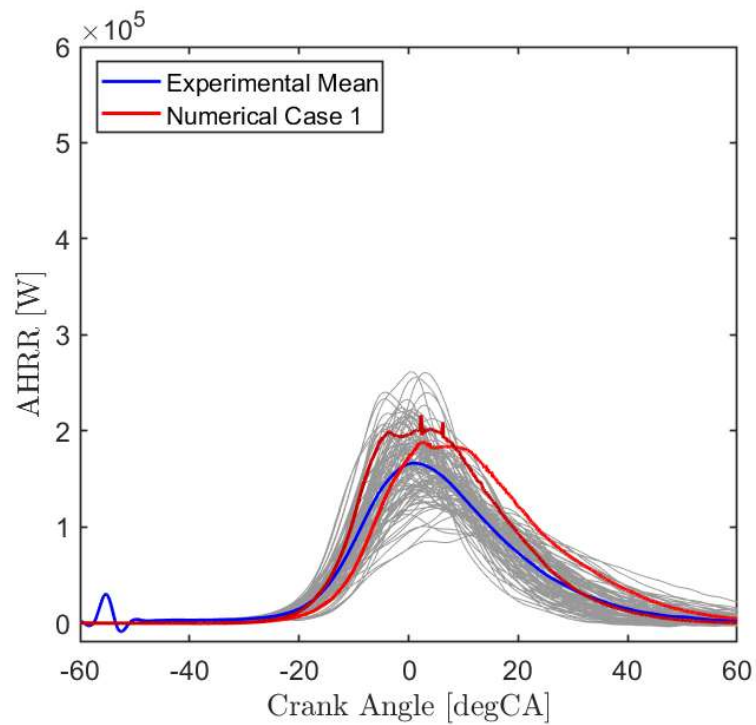


Figura 32 - Curva AHRR caso T128

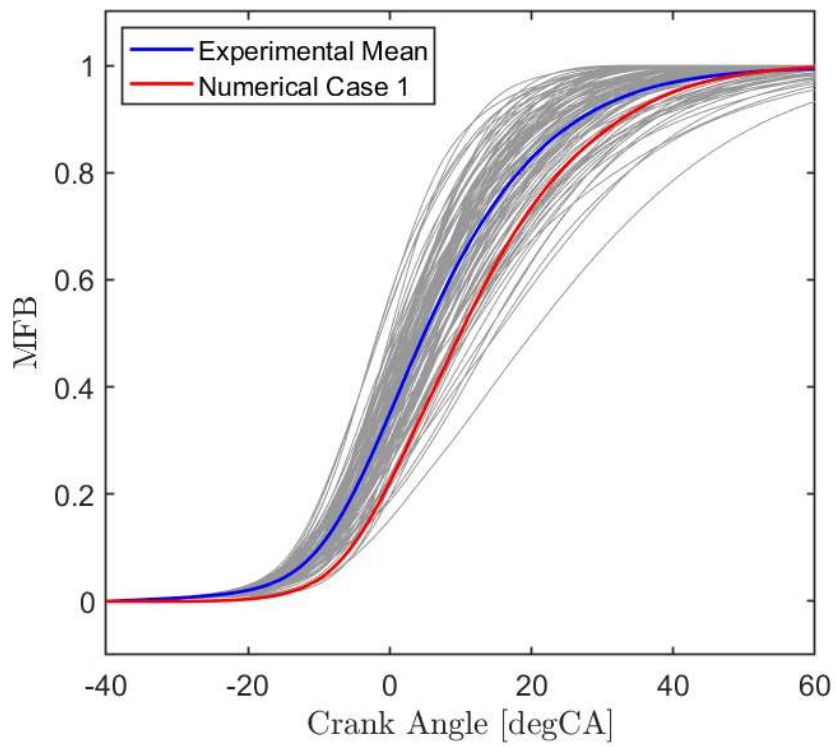


Figura 33 - Curva MFB caso T128

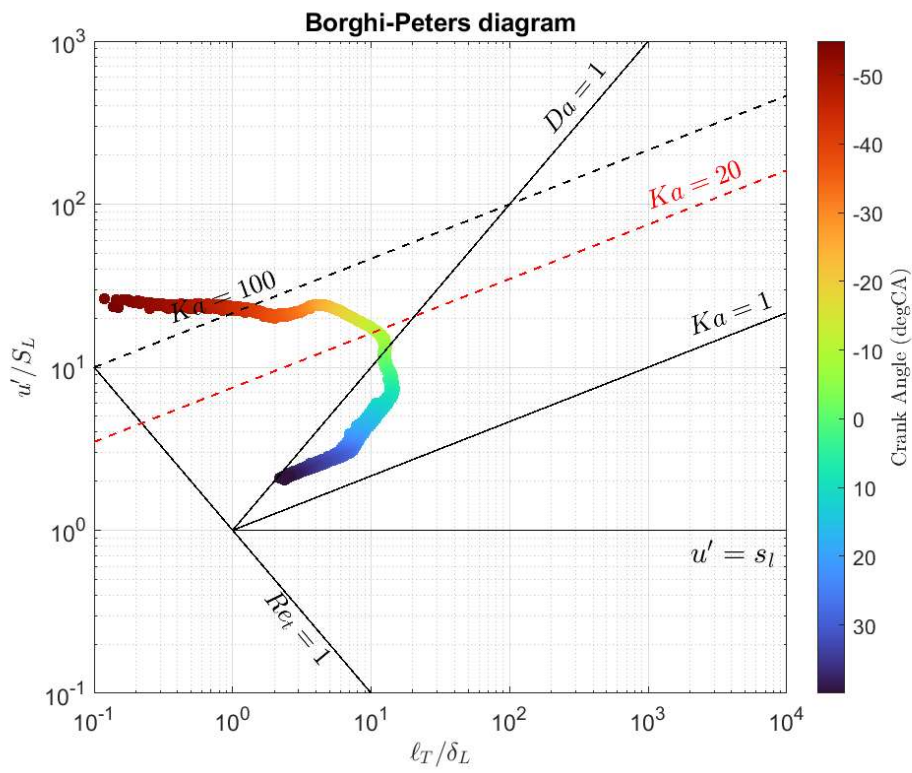


Figura 34 - Diagramma Borghi-Peters caso T128

Caso T129

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.8	0.10	1.5	-42

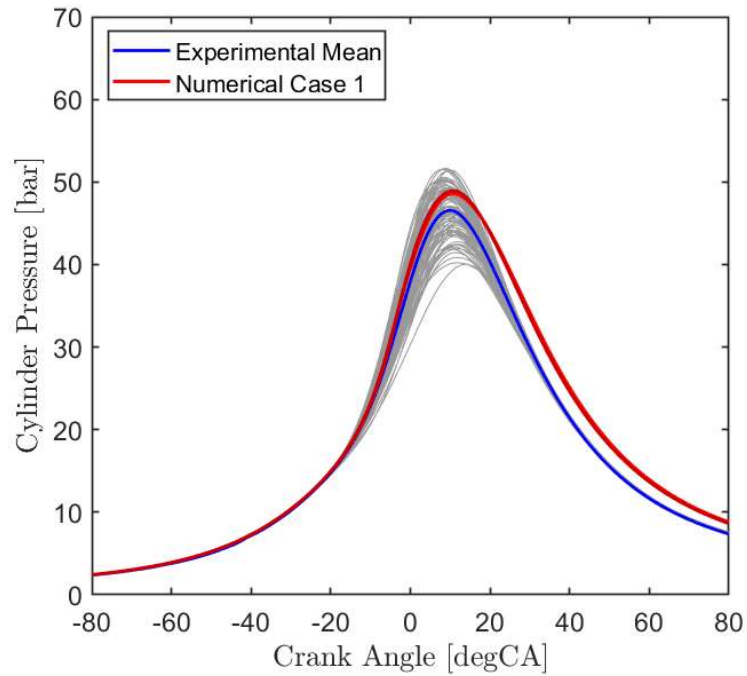


Figura 35 – Curva di pressione caso T129

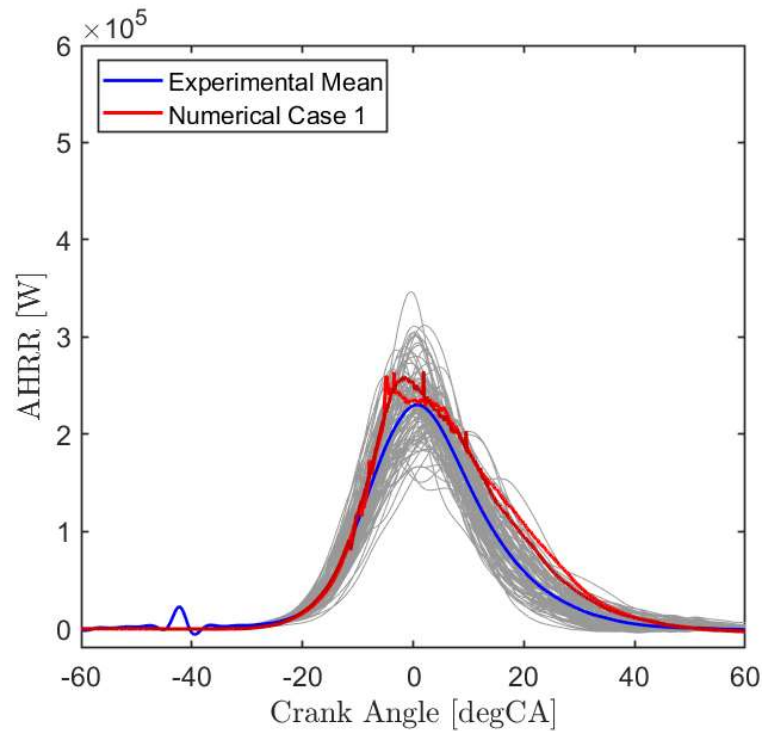


Figura 36 - Curva di AHRR caso T129

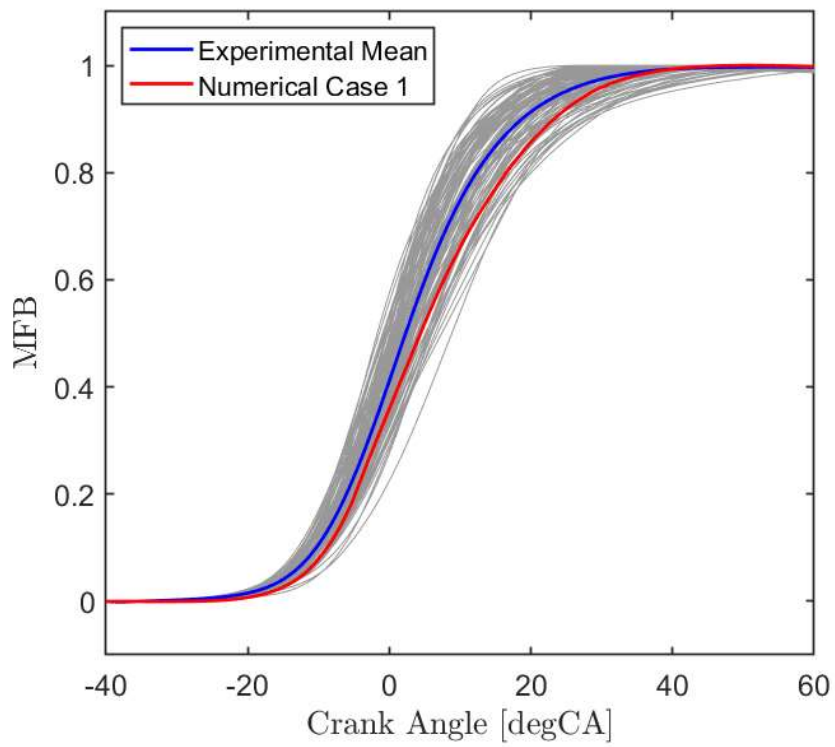


Figura 37 - Curva di MFB caso T129

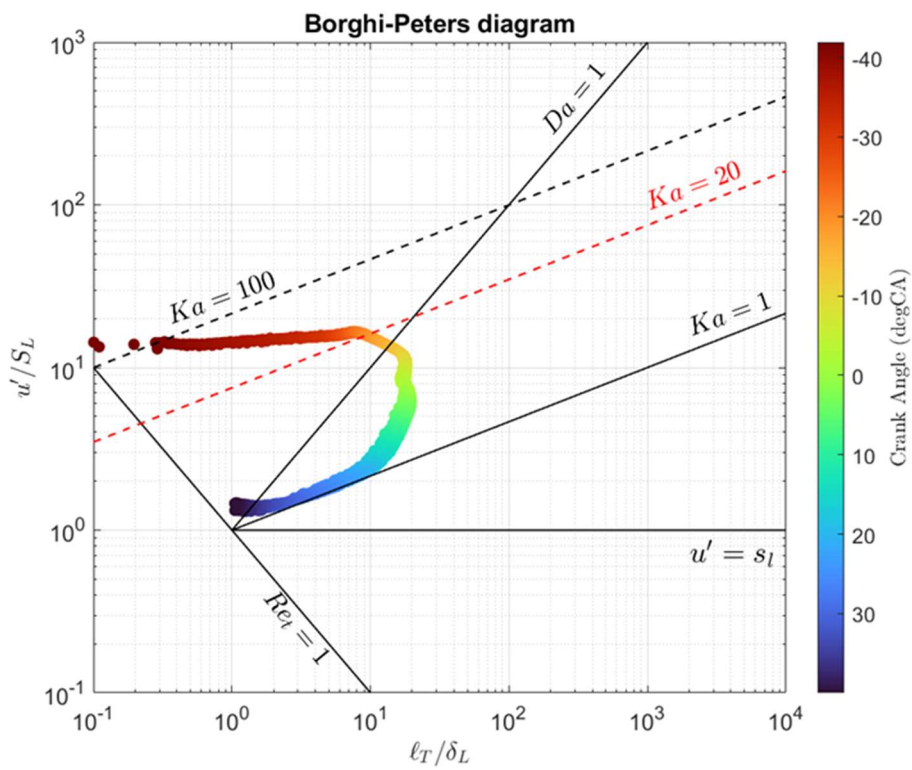


Figura 38 - Diagramma Borghi-Peters caso T129

Caso T130

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.9	0.10	1.2	-35

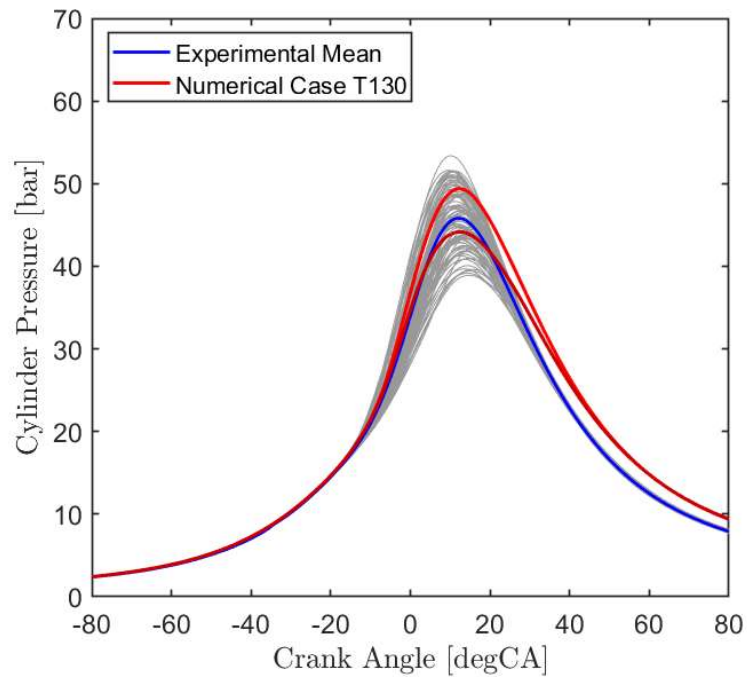


Figura 39 - Curva di pressione caso T130

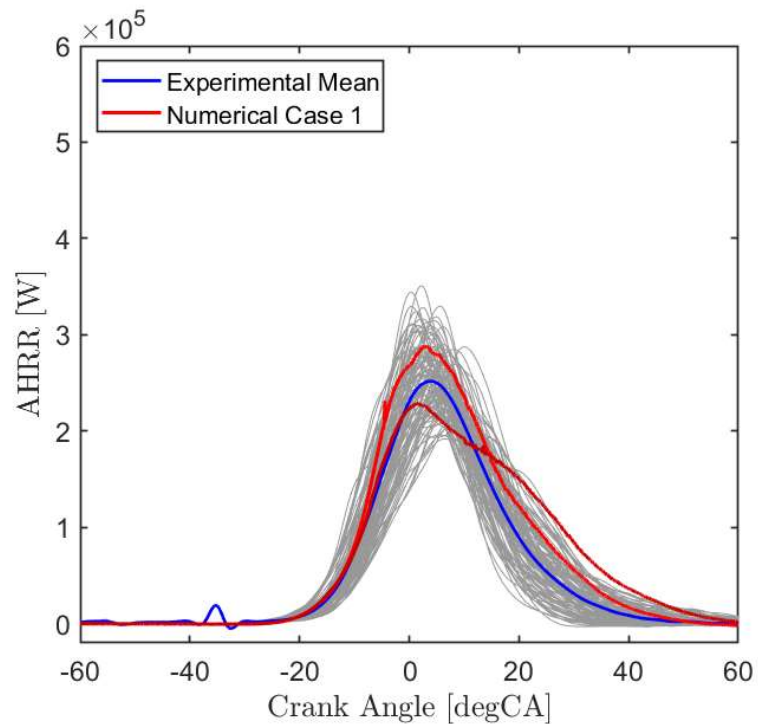


Figura 40 - Curva di pressione caso T130

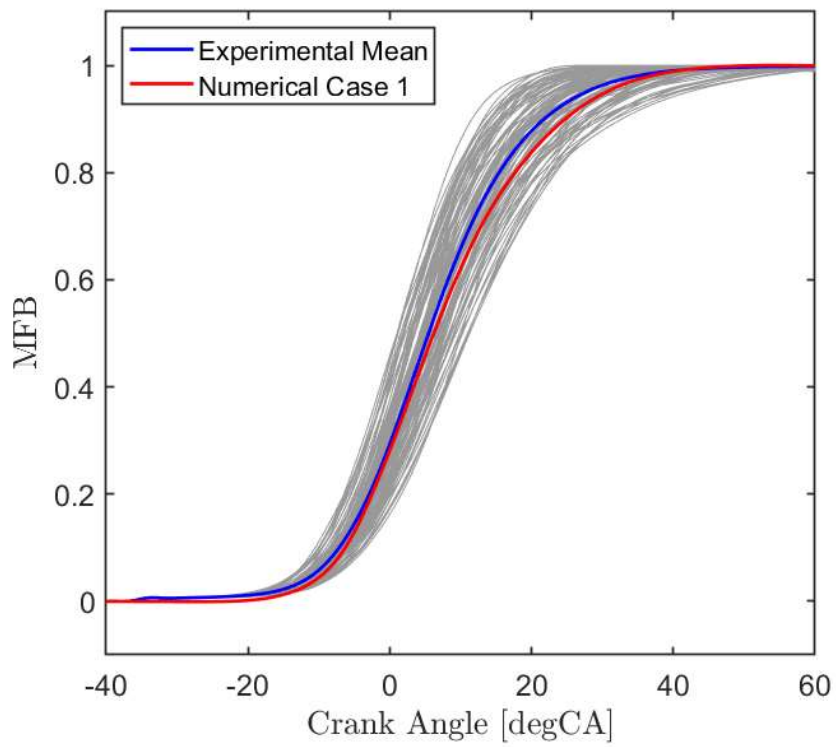


Figura 41 - Curva di MFB caso T130

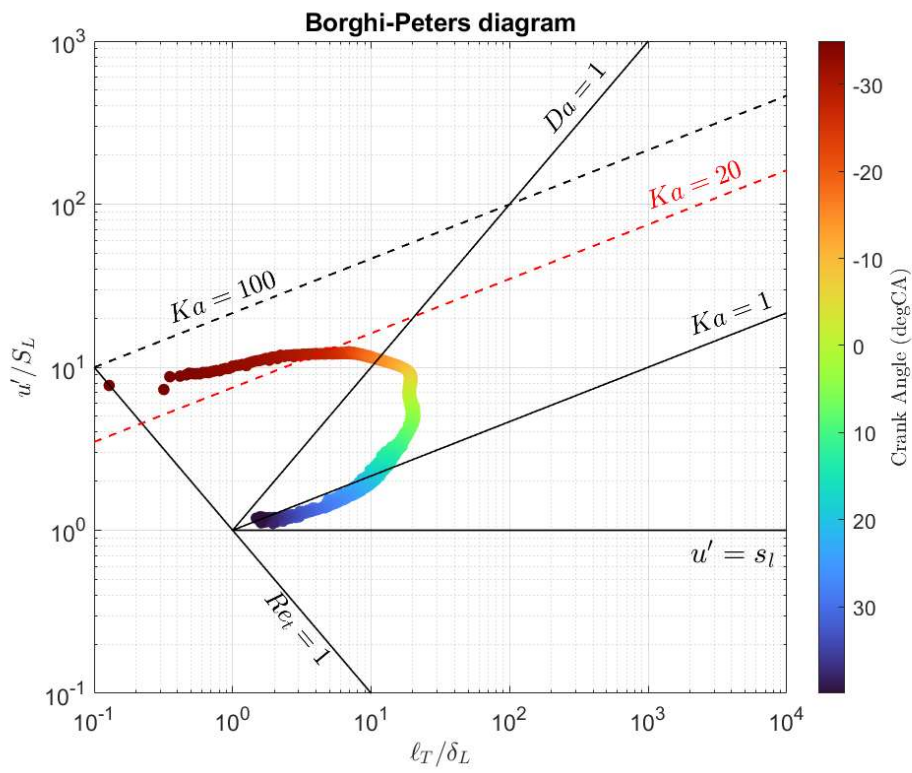


Figura 42 - Diagramma Borghi-Peters caso T130

Caso T131

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [$^{\circ}$ CA]
1	0.10	1.0	-35

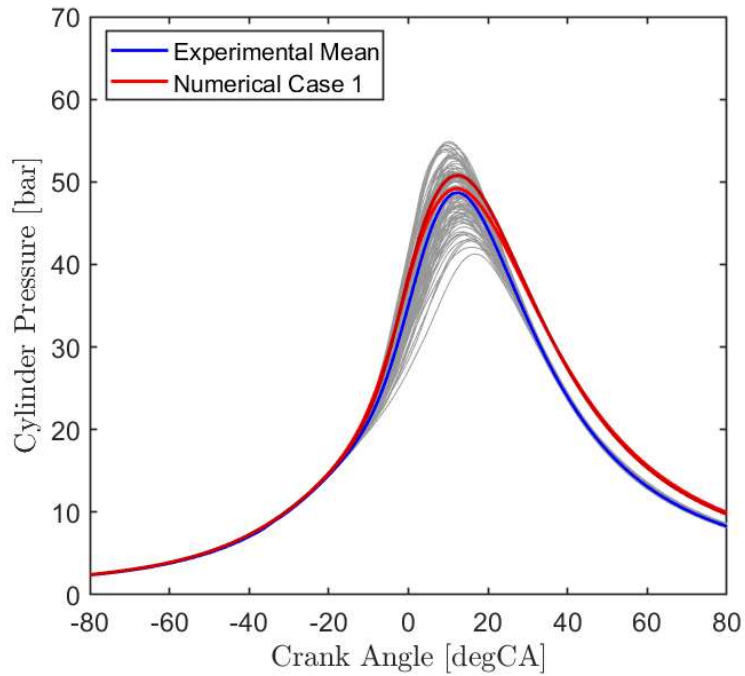


Figura 43 - Curva di pressione caso T131

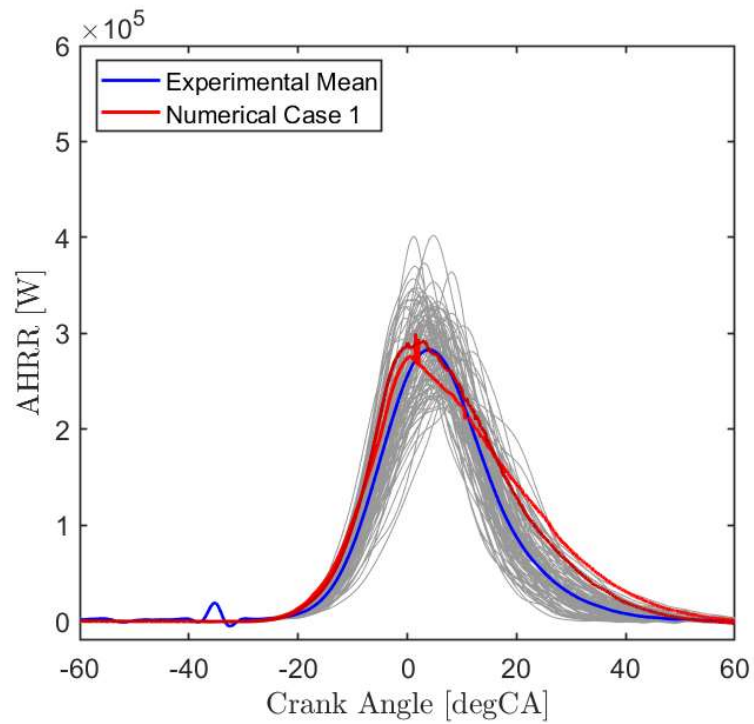


Figura 44 - Curva di AHRR caso T131

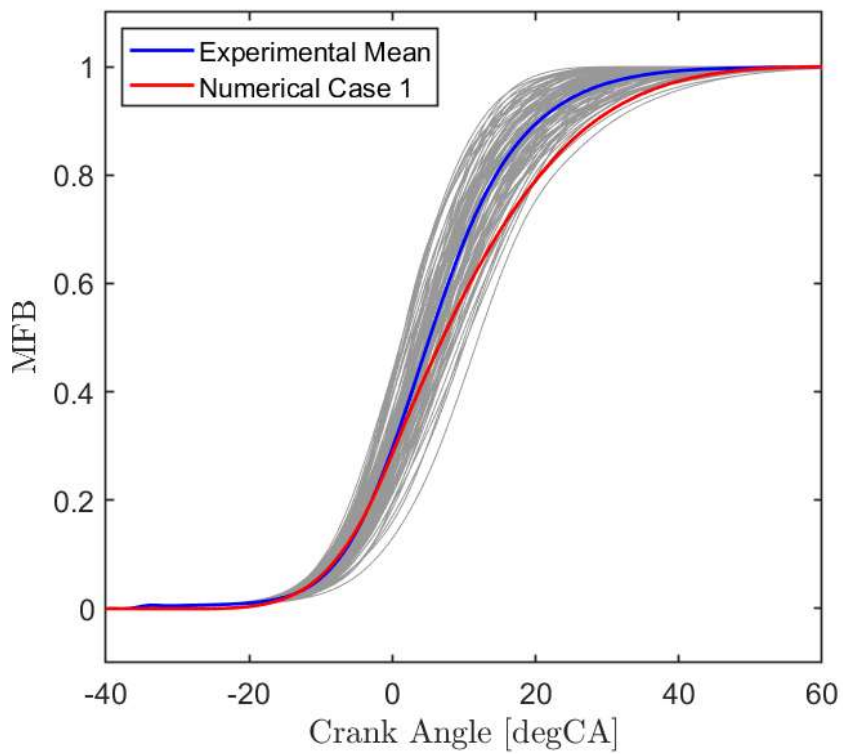


Figura 45 - Curva di MFB caso T131

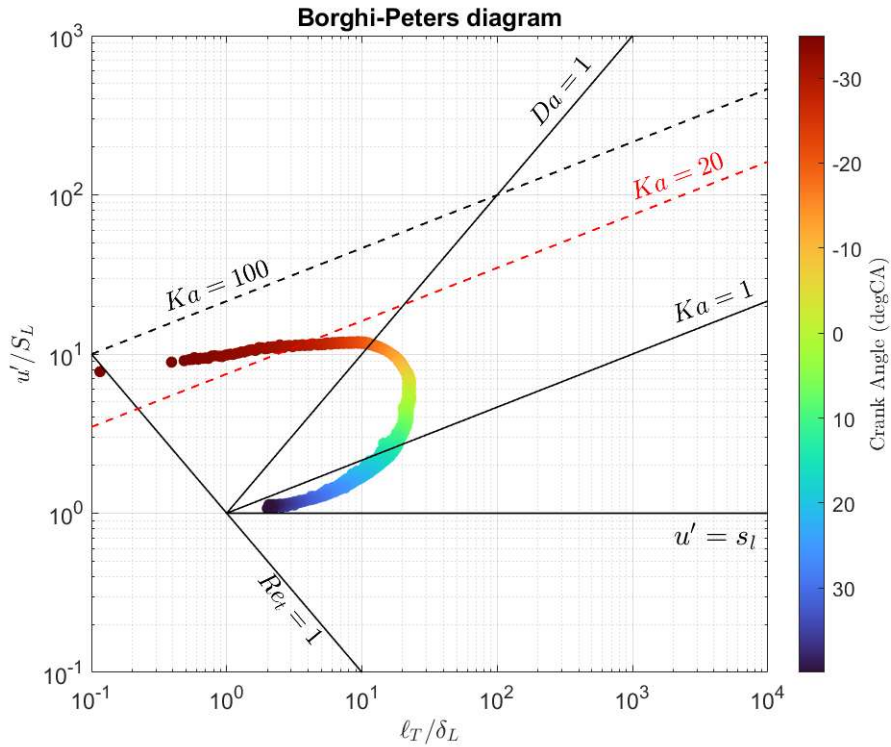


Figura 46 - Diagramma Borghi-Peters caso T131

Caso T134

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.6	0.20	13	-50

Il punto T134 ha un comportamento anomalo, è risultato molto meno sensibile alla calibrazione in confronto alle altre configurazioni. Variare b_1 nell'ordine dei decimi, come negli altri casi, non ha comportato alcuna differenza notevole sulle curve simulate. Al fine di verificare le prestazioni del modello, è stato adottato un valore superiore di un ordine di grandezza rispetto a quello normalmente utilizzato. Sebbene tale scelta abbia prodotto un miglioramento nell'andamento delle curve, la procedura di calibrazione non è stata ulteriormente approfondita, poiché l'inadeguatezza del modello nel riprodurre il punto in esame risultava ormai evidente. Tale inadeguatezza può essere ricondotta al regime di combustione che contraddistingue il punto in esame. Dal diagramma di Borghi-Peters si può osservare che la fase iniziale di combustione è caratterizzata dal numero di Karlovitz superiore a 100. In prossimità della retta $Ka=100$ si individua la transizione da regime thin reaction zone a broken reaction zone; perciò, si può affermare che in questo caso il regime di combustione non è prettamente di tipo thin. Però il modello G-equation utilizzato è stato sviluppato per simulare la combustione nel regime flamelet o thin reaction zone e di conseguenza risulta inadeguato per questo punto operativo. Un altro caso caratterizzato dal valore di b_1 molto più alto rispetto la media è il punto T128. Anch'esso si trova a ridosso della curva di stabilità ed è caratterizzato da $Ka>100$ nella prima parte di combustione. Per concludere si può affermare che G-equation riscontri molta difficoltà quando deve simulare combustioni caratterizzate dal numero di Karlovitz superiore a 100, in quanto non è stato formulato per rappresentare tali scenari.

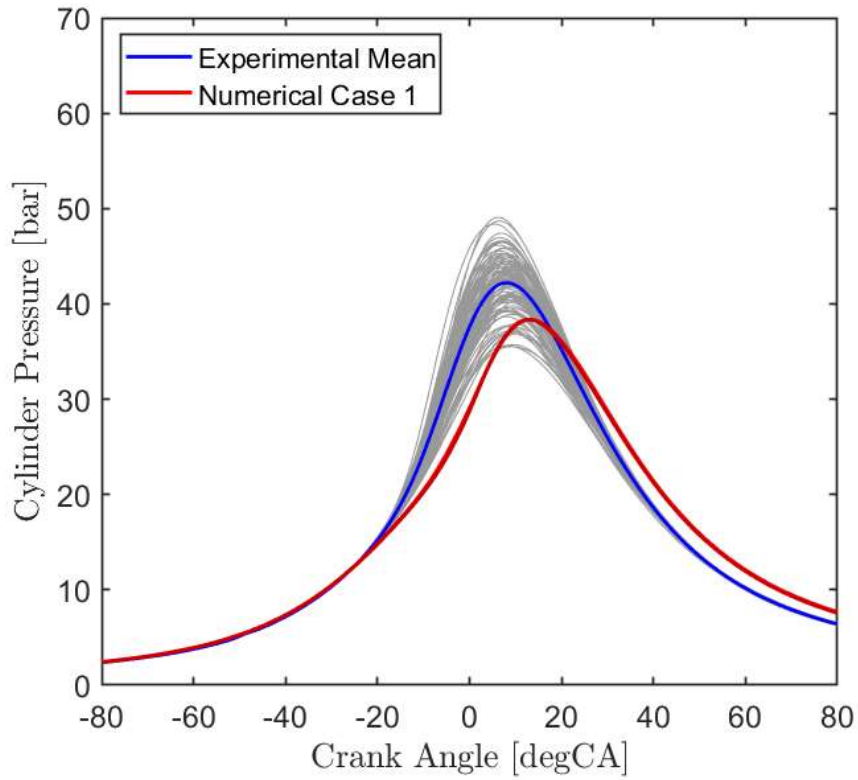


Figura 47 - Curva di pressione caso T134

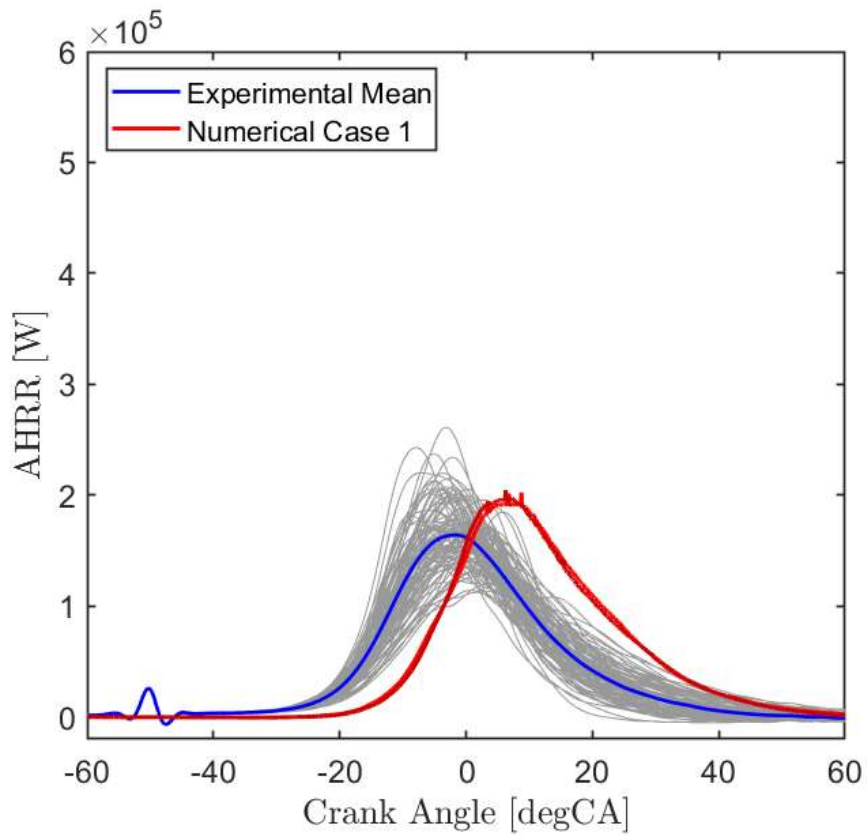


Figura 48 - Curva di AHRR caso T134

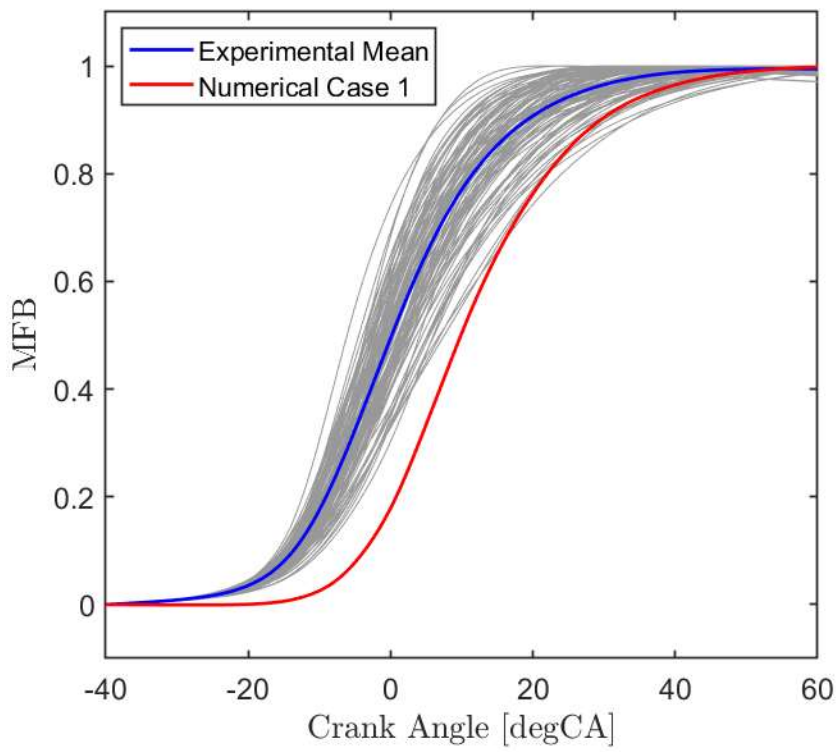


Figura 49 - Curva di MFB caso T134

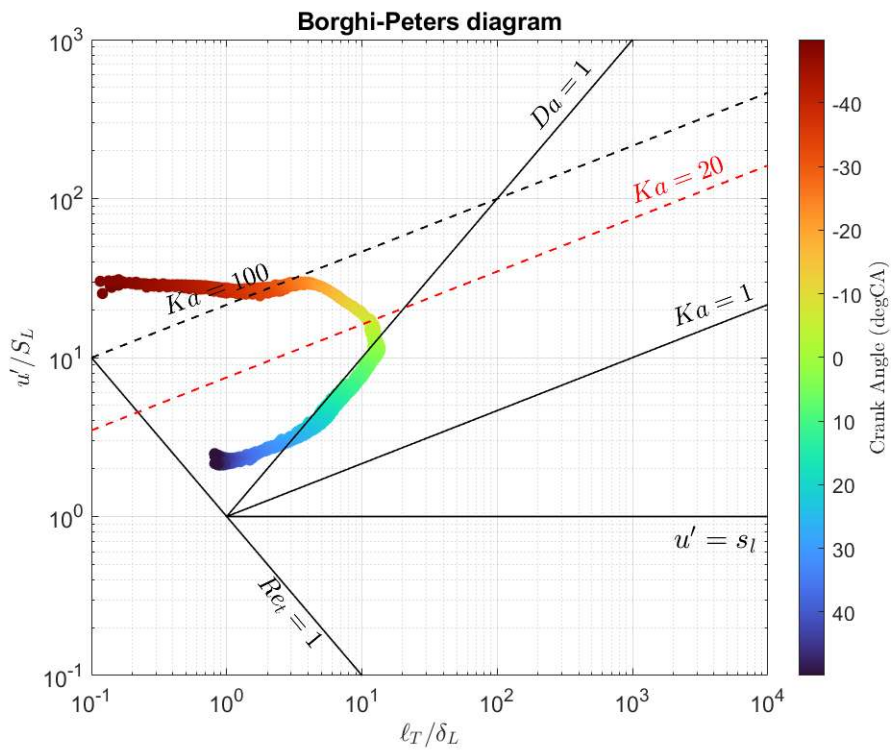


Figura 50 - Diagramma Borghi-Peters caso T134

Caso T135

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.7	0.20	1.8	-35

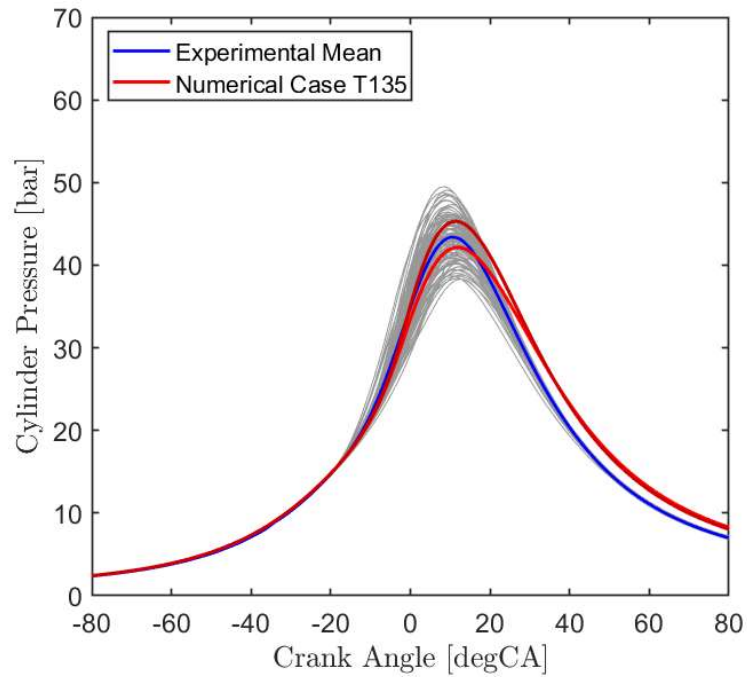


Figura 51 - Curva di pressione caso T135

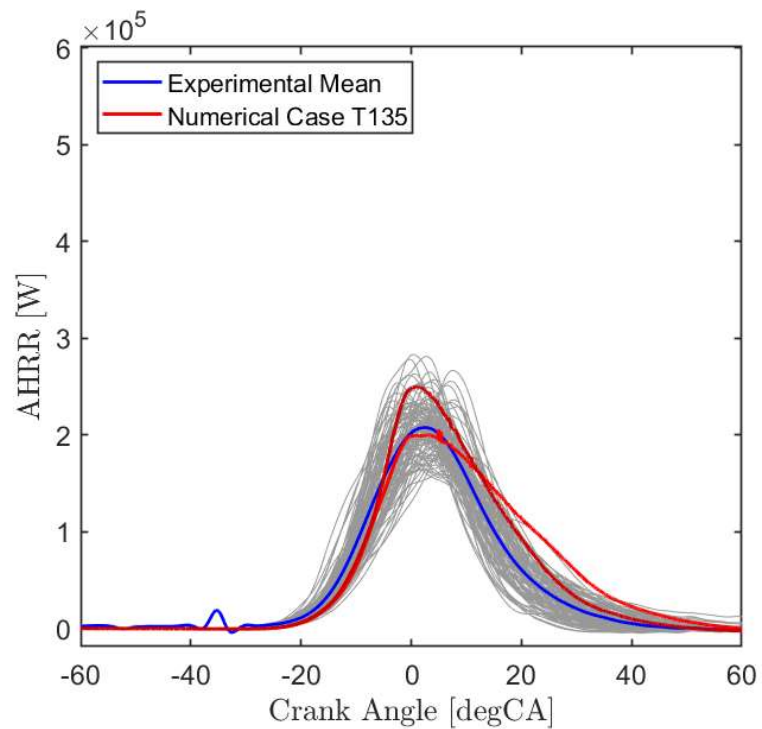


Figura 52 – Curva di AHRR caso T135

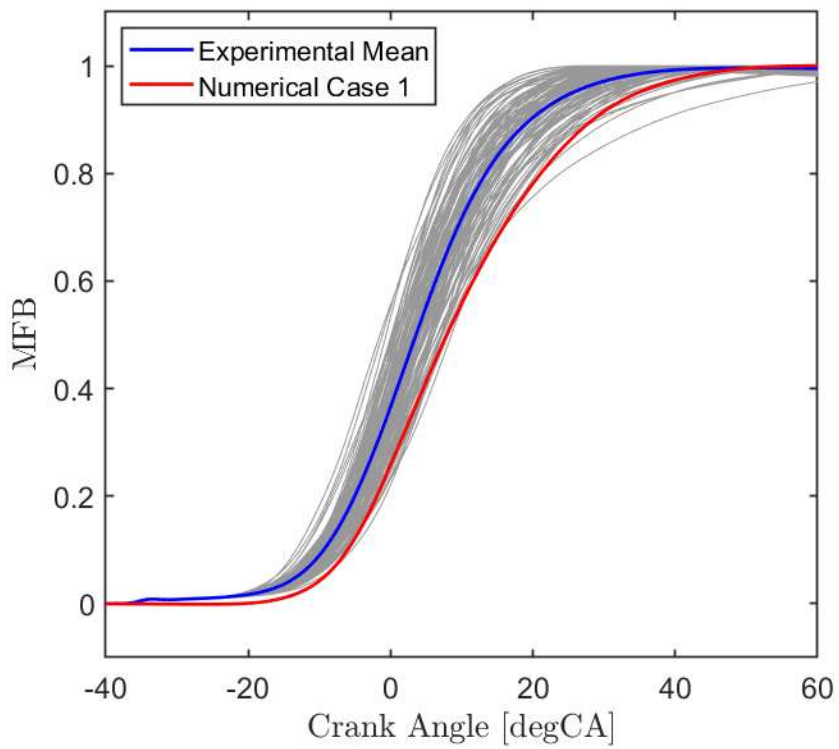


Figura 53 - Curva di MFB caso T135

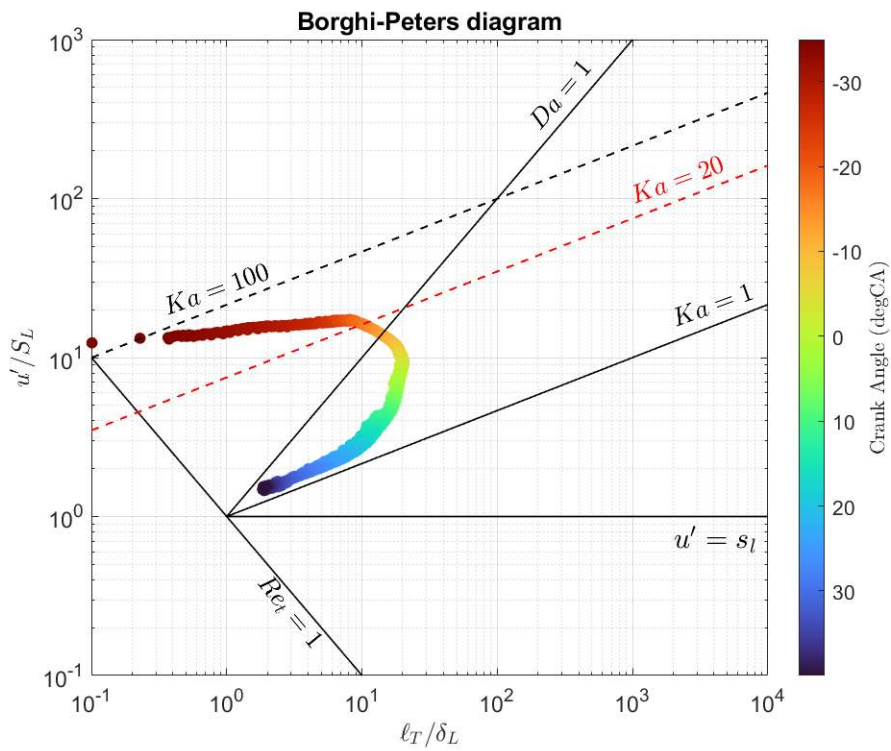


Figura 54 - Diagramma di Borghi-Peters caso T135

Caso T136

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.8	0.20	1.8	-30

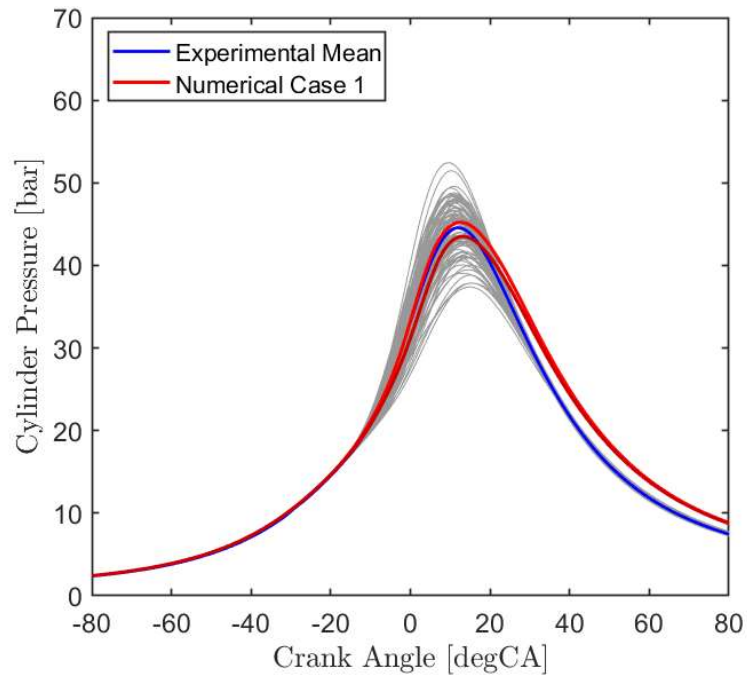


Figura 55 - Curva di pressione caso T136

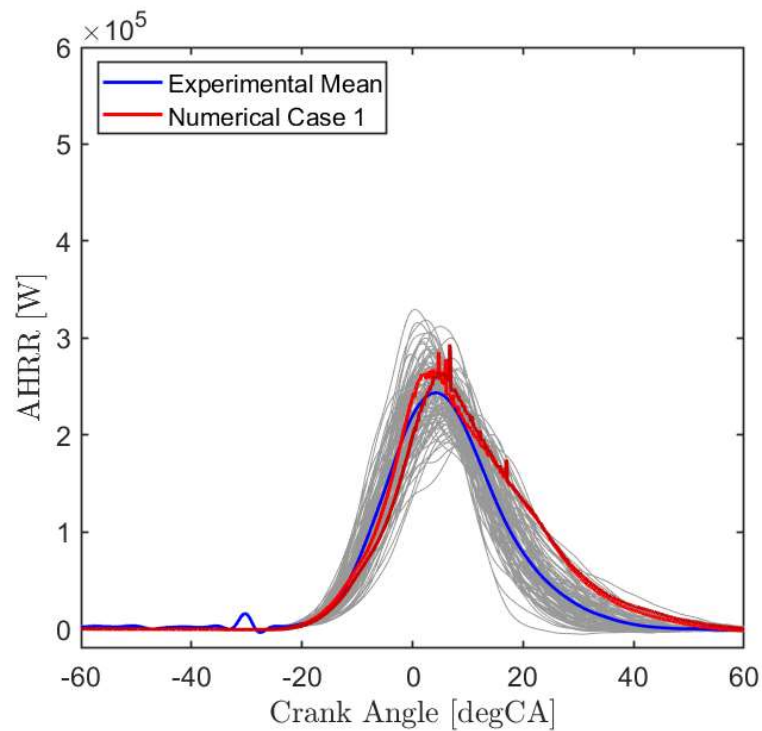


Figura 56 - Curva di AHRR caso T136

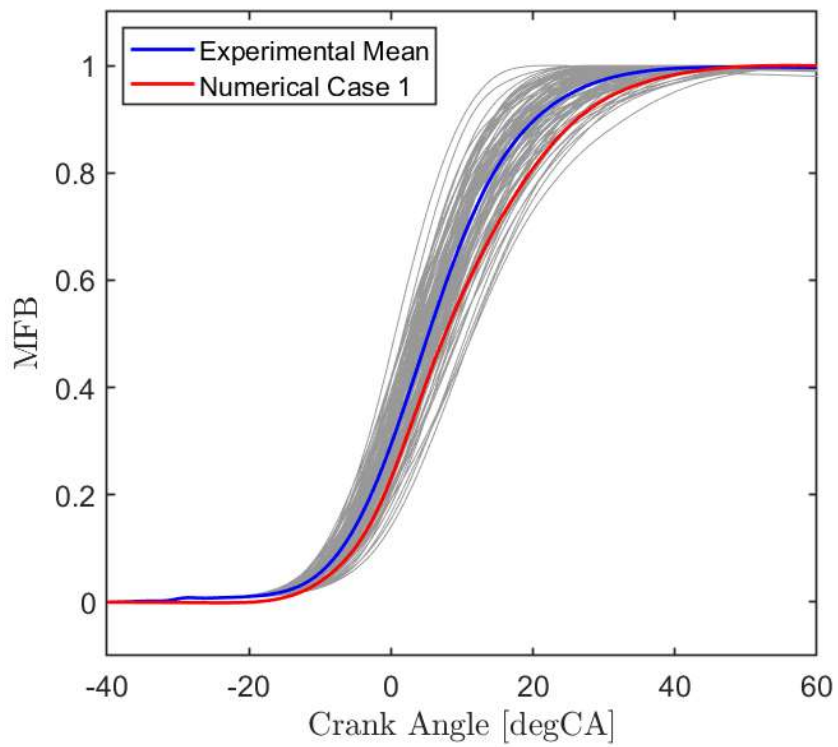


Figura 57 - Curva di MFB caso T136

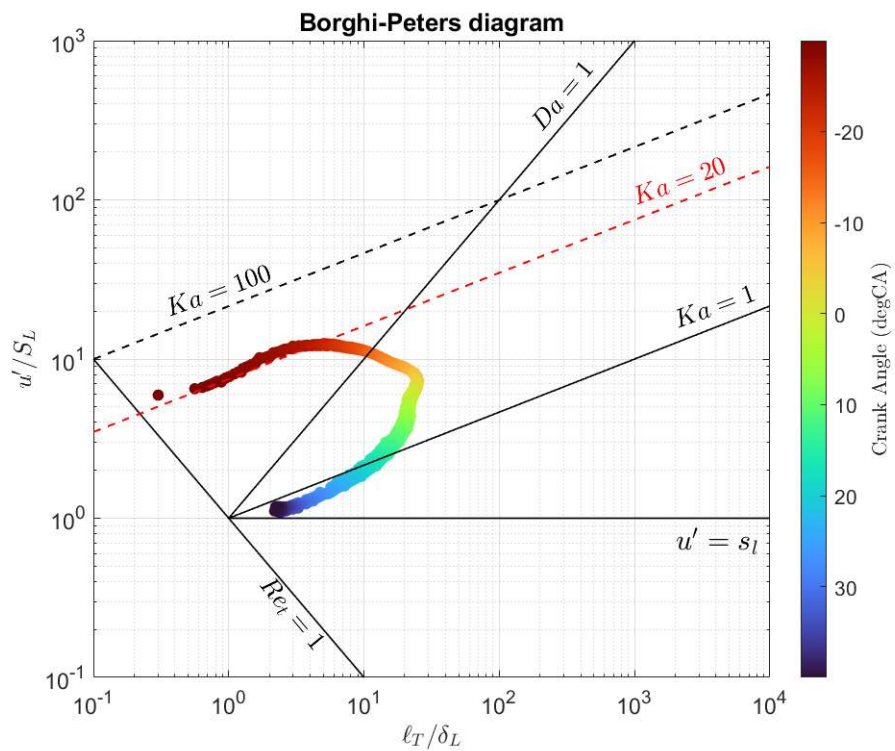


Figura 58 - Diagramma di Borghi-Peters caso T136

Caso T137

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.9	0.20	1.0	-27

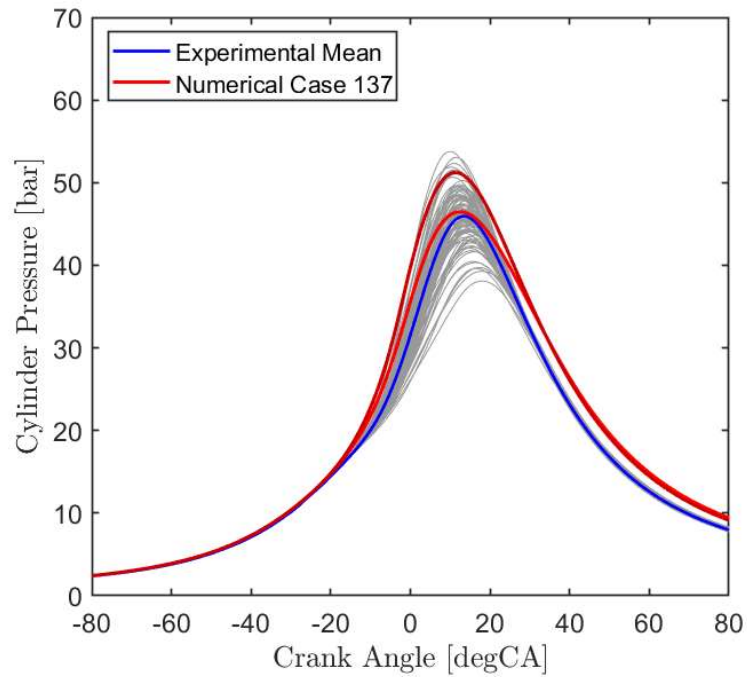


Figura 59 - Curva di pressione caso T137



Figura 60 - Curva di AHRR caso T137

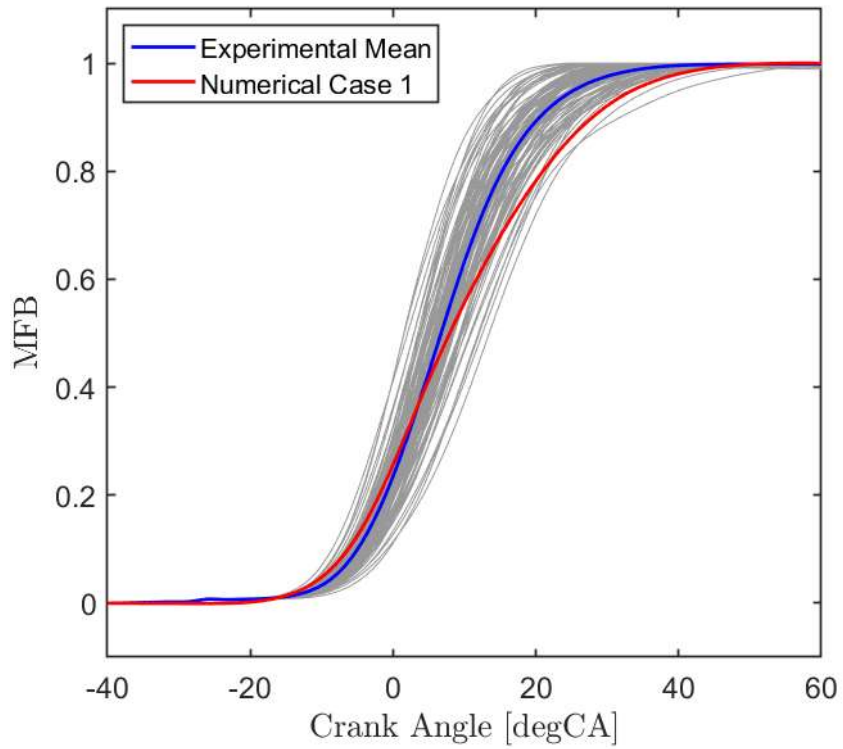


Figura 61 - Curva di MFB caso T137

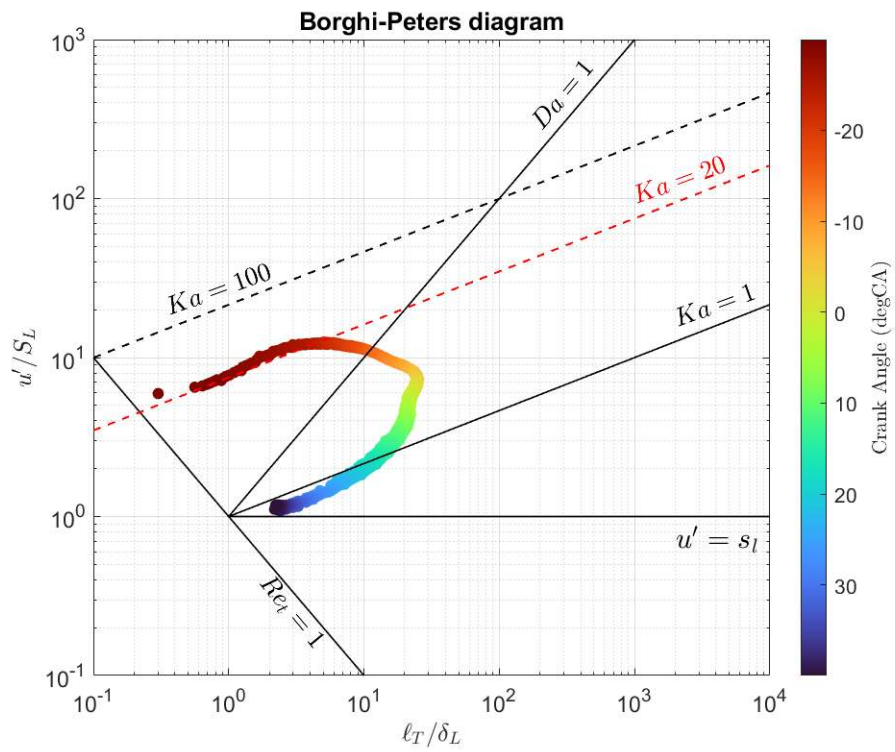


Figura 62 - Diagramma di Borghi-Peters caso T137

Caso T138

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [$^{\circ}$ CA]
1.0	0.19	1.0	-27

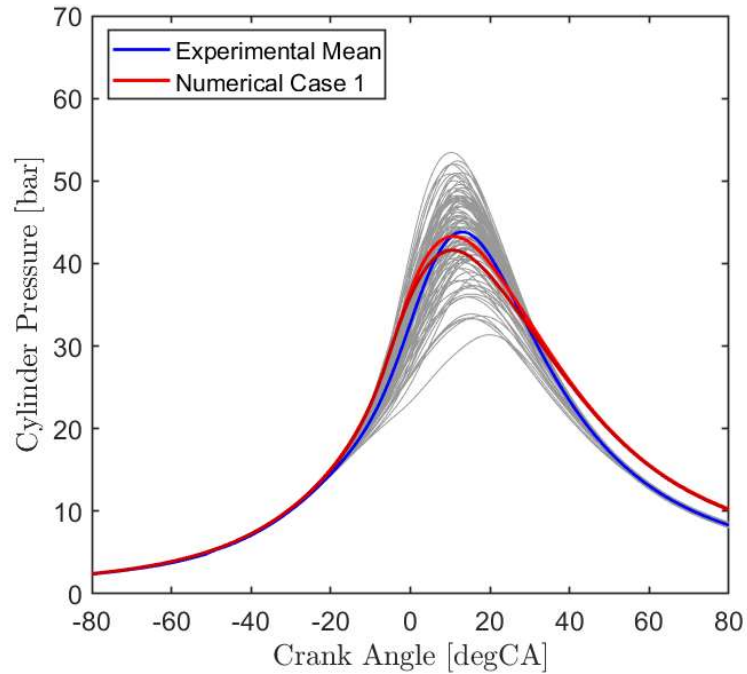


Figura 63 - Curva di pressione caso T138

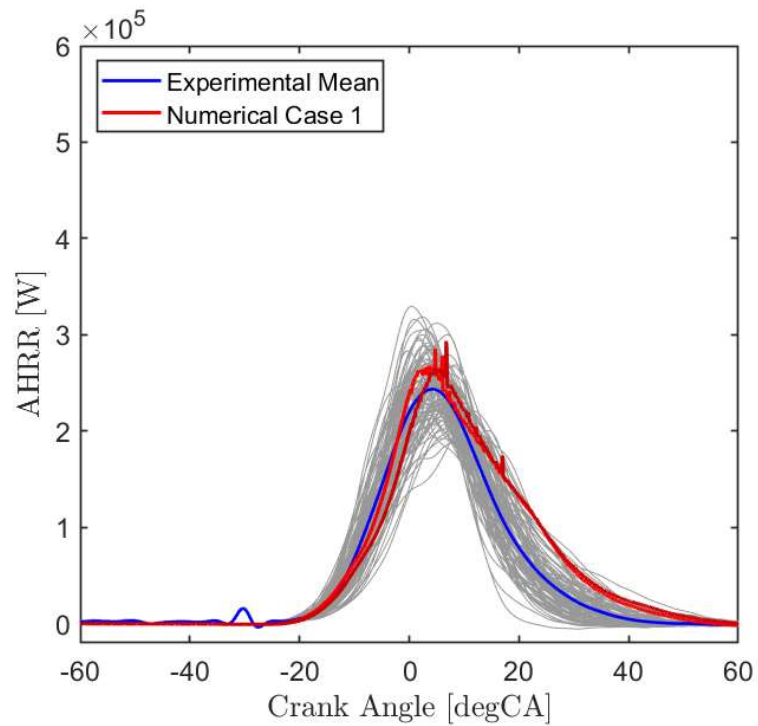


Figura 64 - Curva di AHRR caso T138

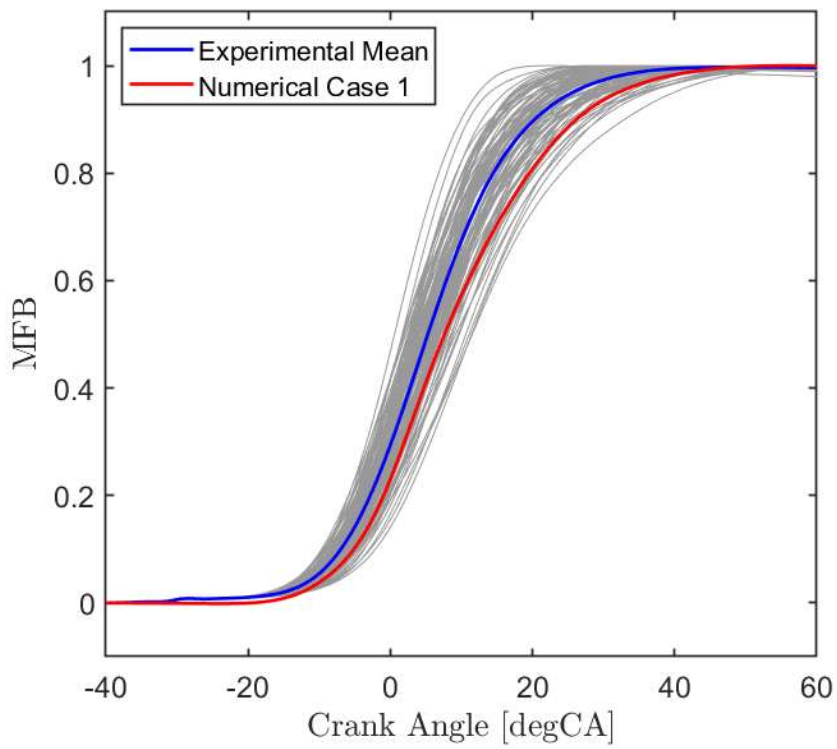


Figura 65 - Curva di MFB caso T138

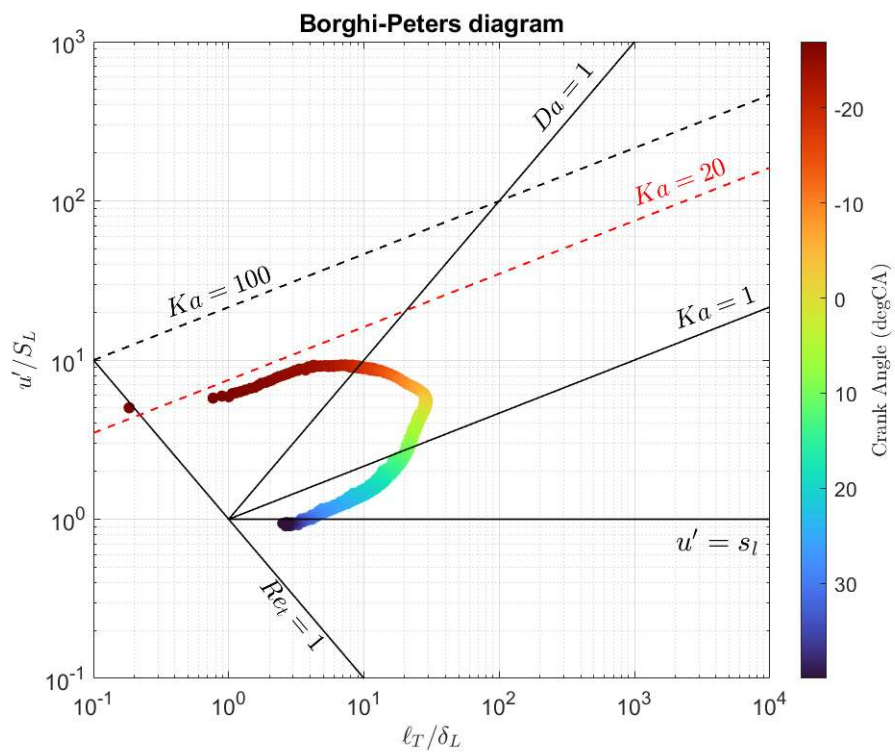


Figura 66 - Diagramma Borghi-Peters caso T138

Caso T141

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.6	0.40	1.9	-27

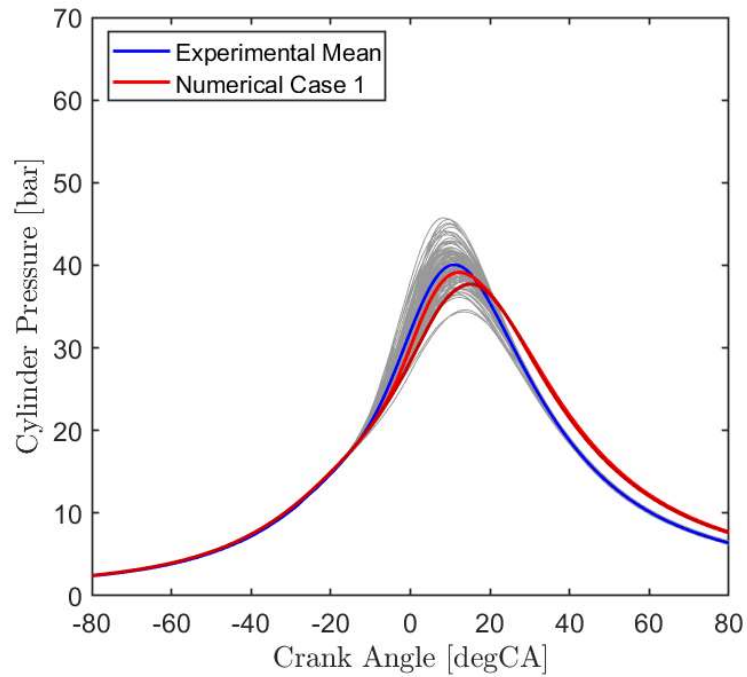


Figura 67 - Curva di pressione caso T141

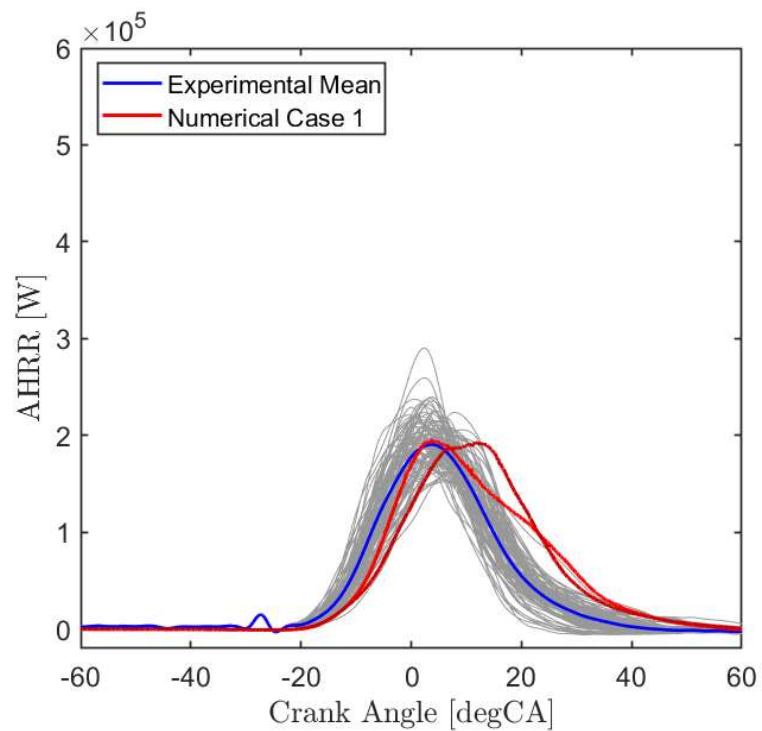


Figura 68 - Curva di AHRR caso T141

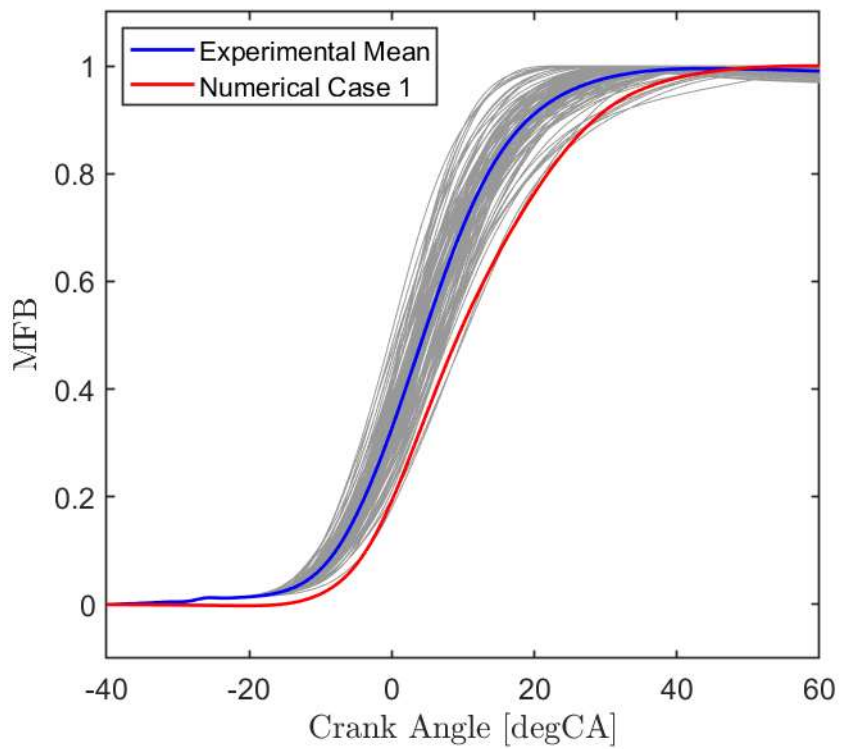


Figura 69 - Curva di MFB caso T141

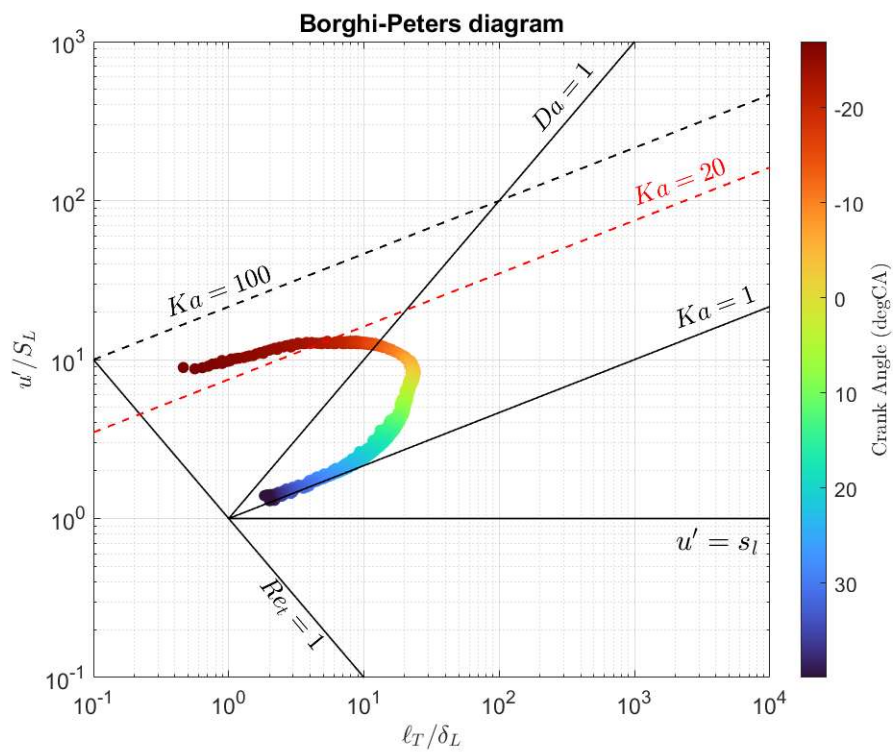


Figura 70 - Diagramma Borghi-Peters caso T141

Caso T143

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.8	0.40	1.1	-20

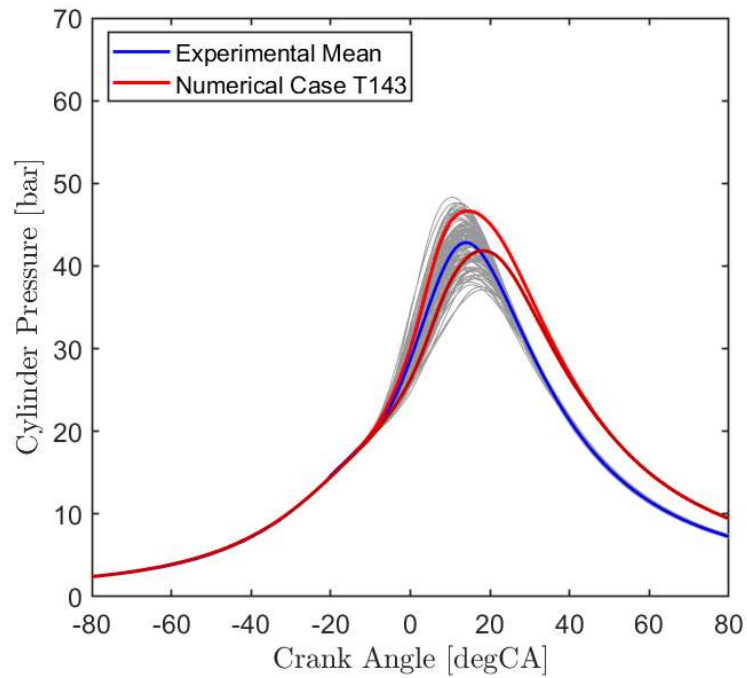


Figura 71 - Curva di pressione caso T143

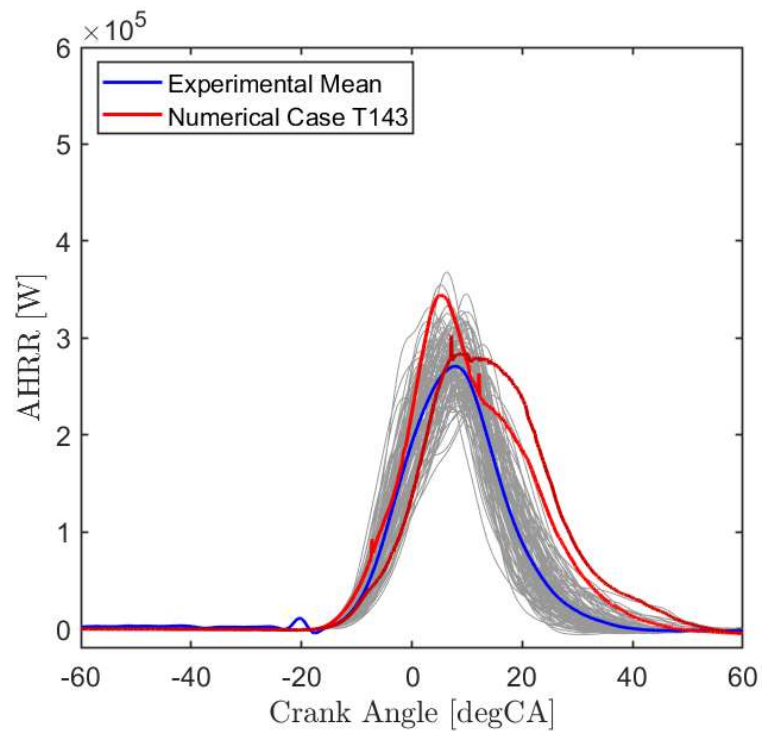


Figura 72 - Curva di AHRR caso T143

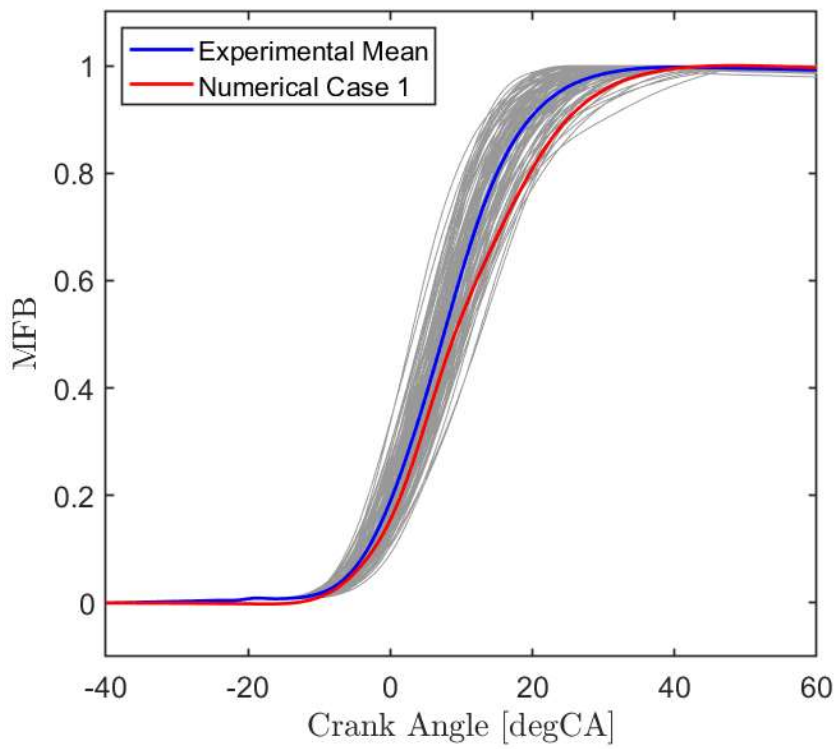


Figura 73 - Curva di MFB caso T143

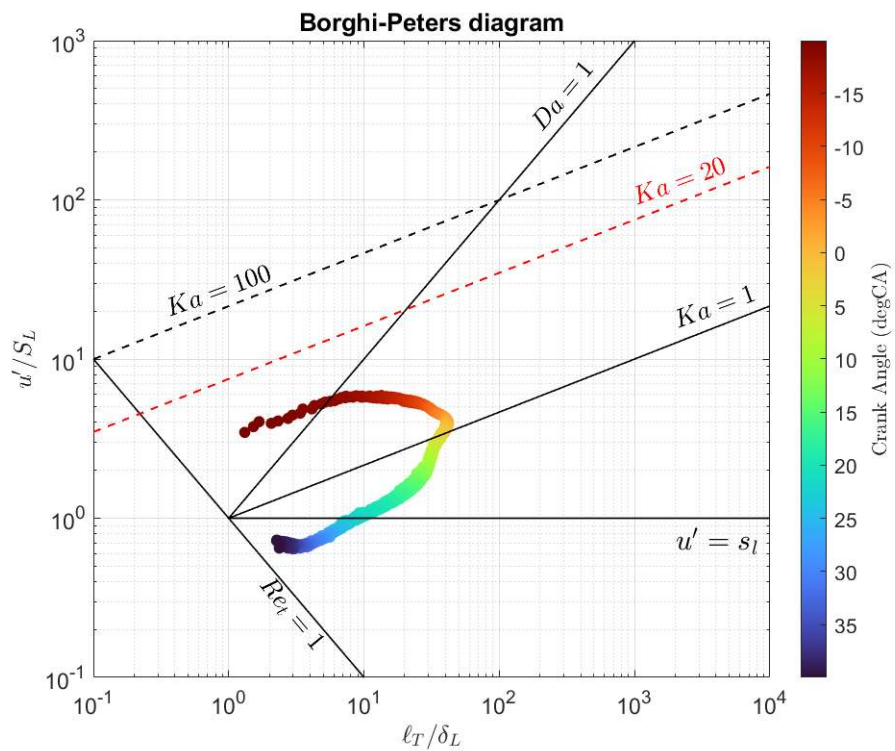


Figura 74 - Diagramma Borghi-Peters caso T143

Caso T145

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [$^{\circ}$ CA]
1.0	0.40	1.2	-20

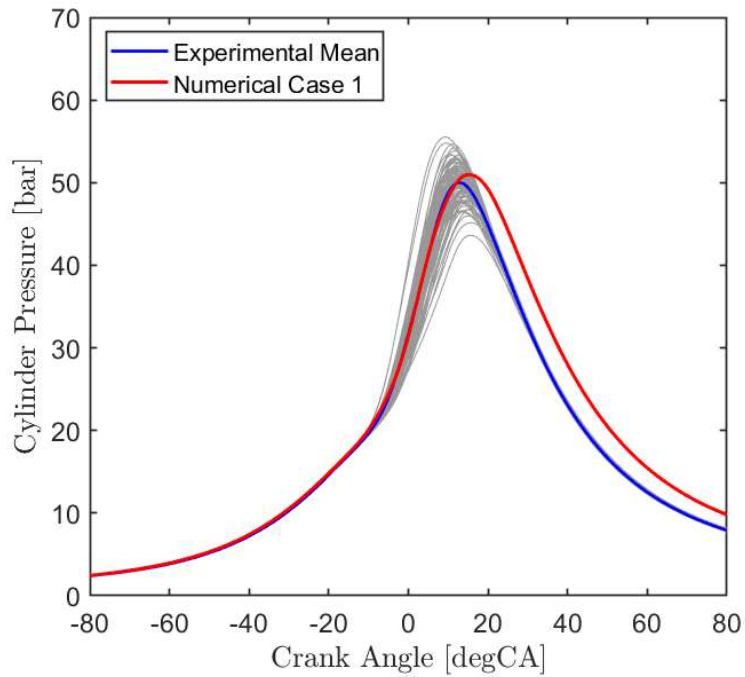


Figura 75 - Curva di pressione caso T145

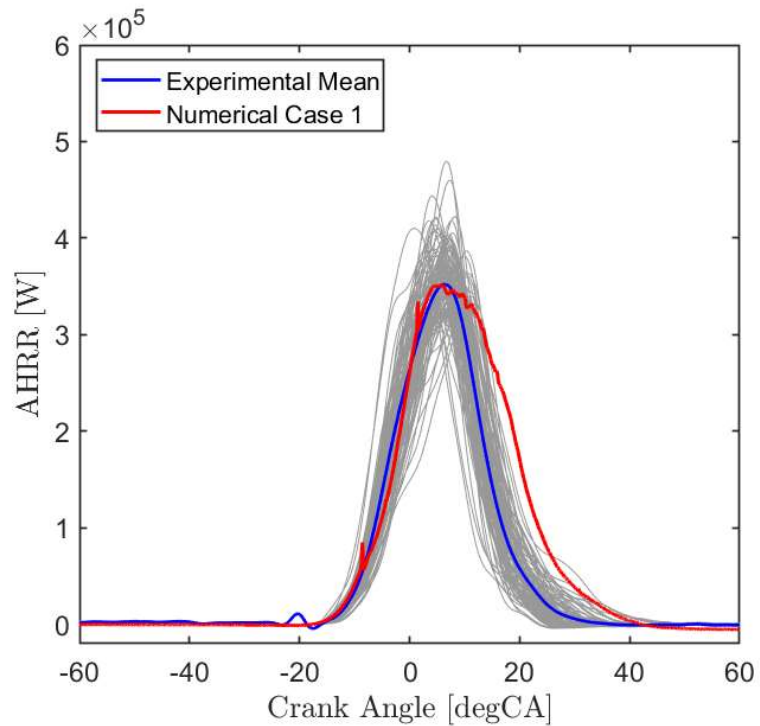


Figura 76 - Curva di AHRR caso T145

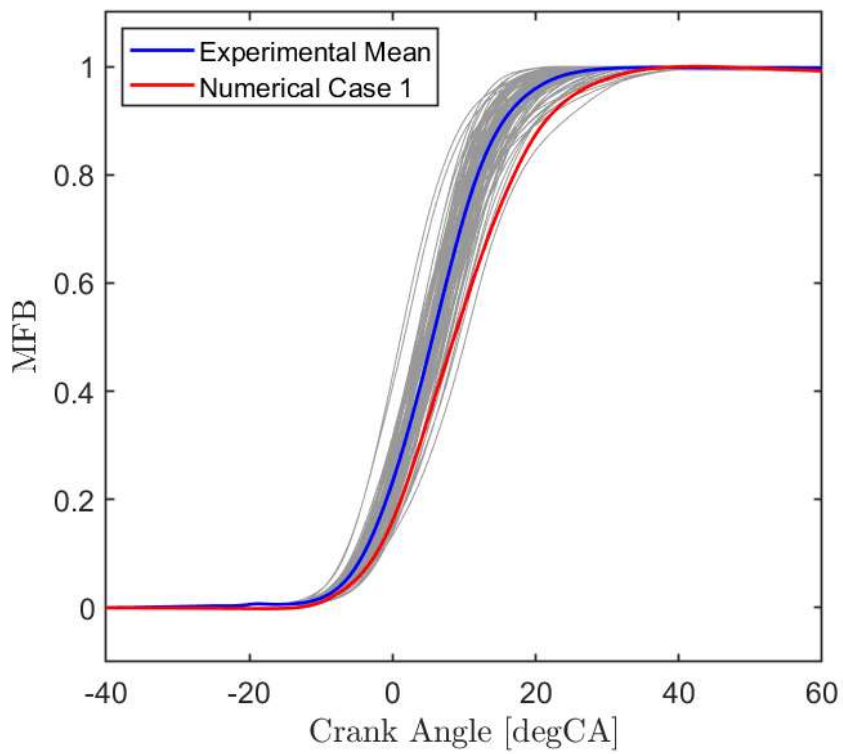


Figura 77 - Curva di MFB caso T145

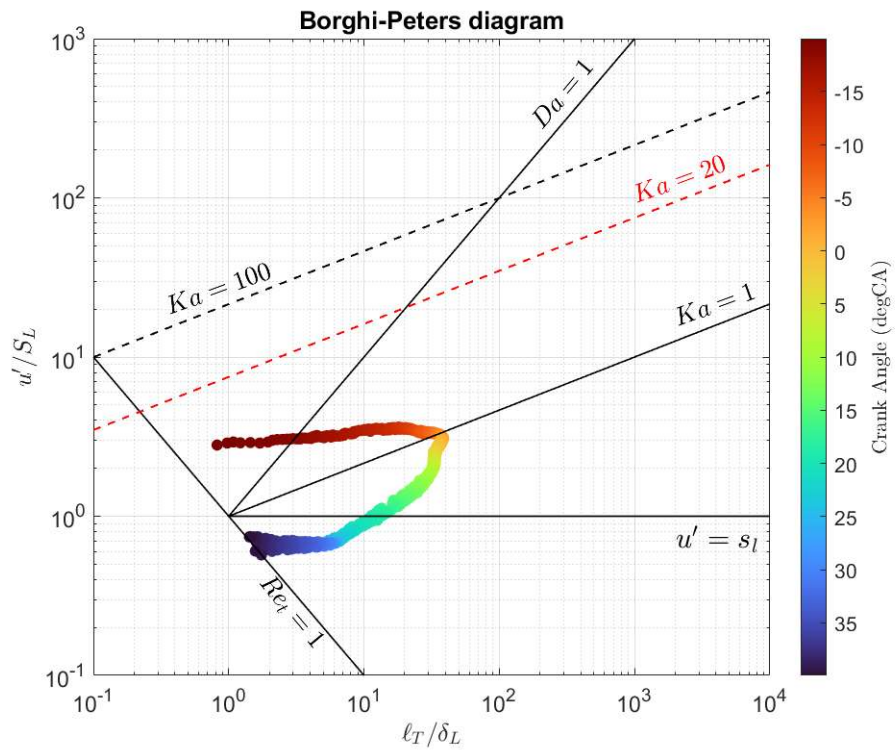


Figura 78 - Diagramma Borghi-Peters caso T145

Caso T148

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.6	0.60	1.4	-20

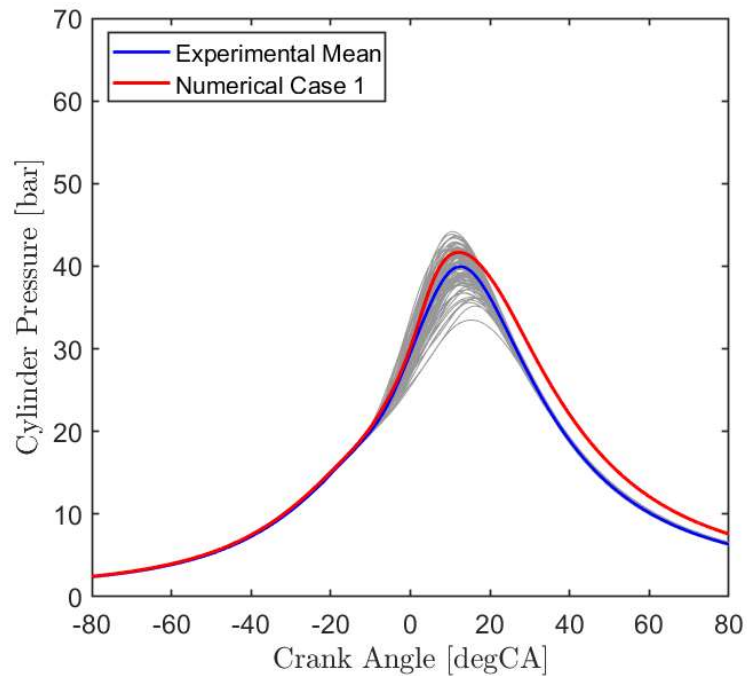


Figura 79 - Curva di pressione caso T148

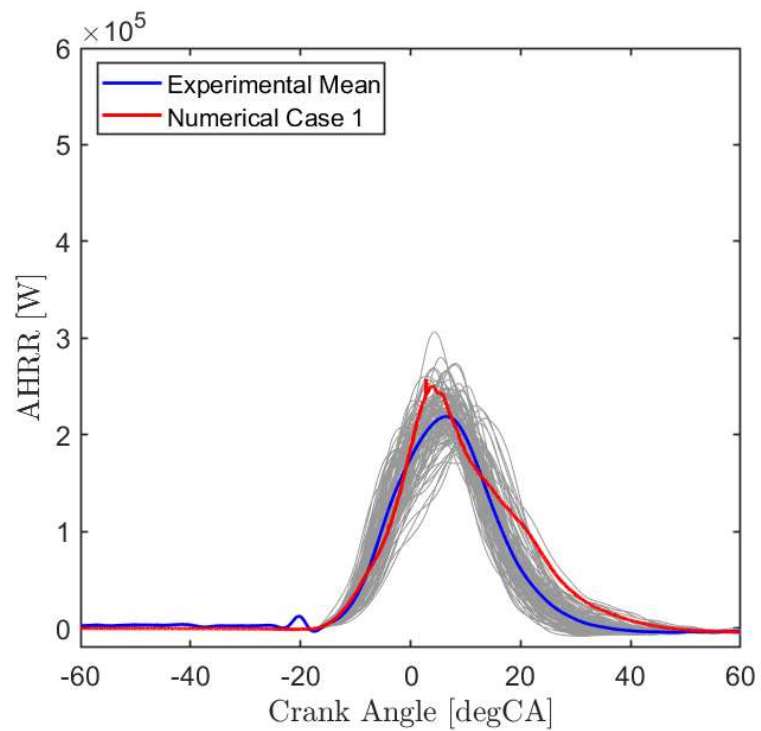


Figura 80 - Curva di AHRR caso T148

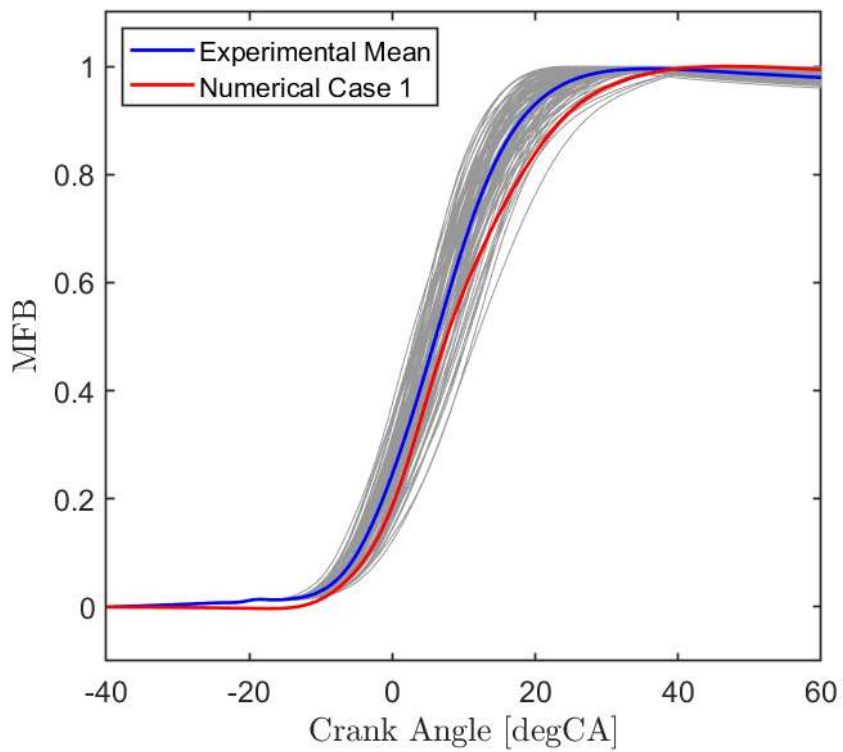


Figura 81 - Curva di MFB caso T148

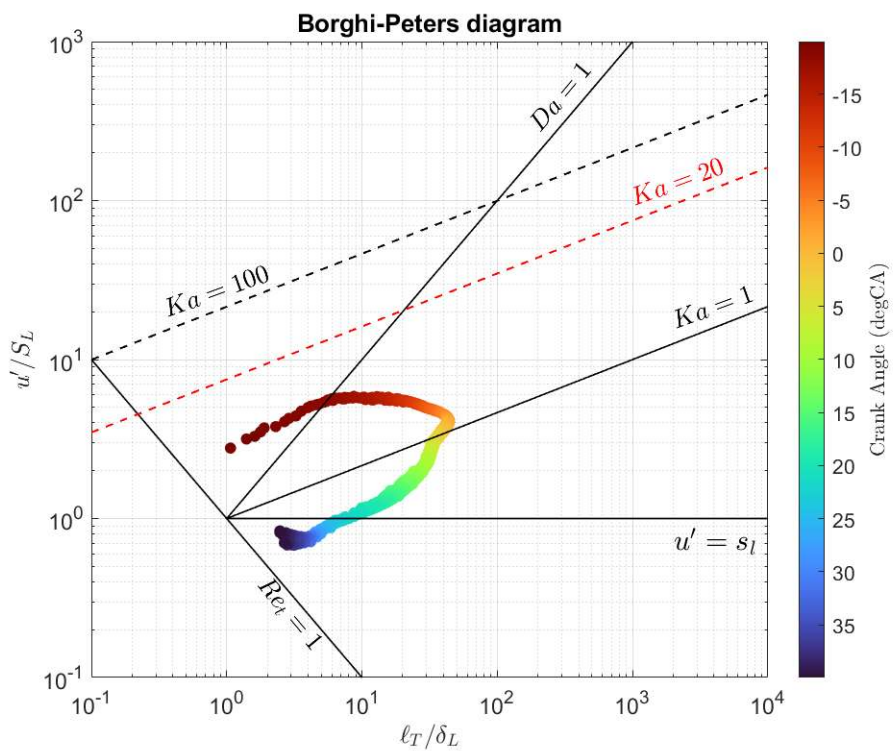


Figura 82 - Diagramma Borghi-Peters caso T148

Caso T150

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
0.8	0.60	1.3	-16

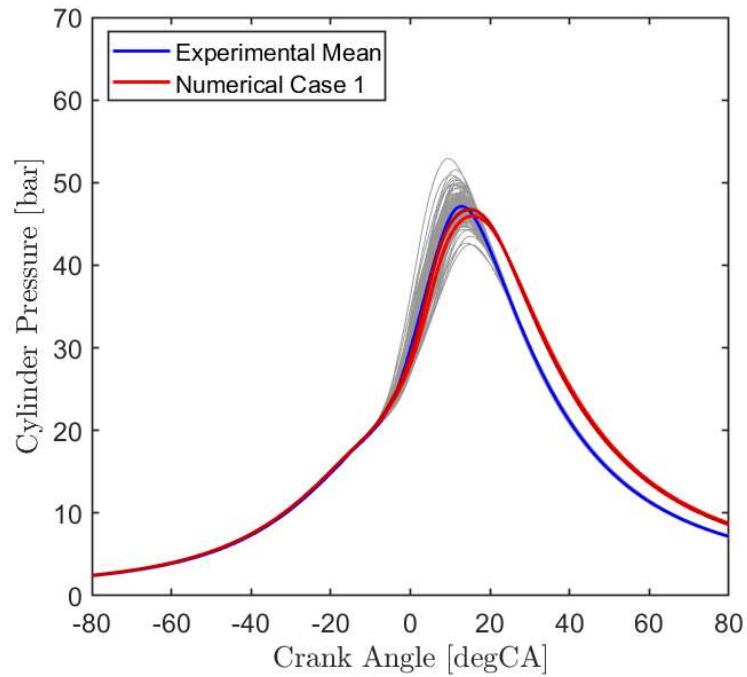


Figura 83 - Curva di pressione caso T150

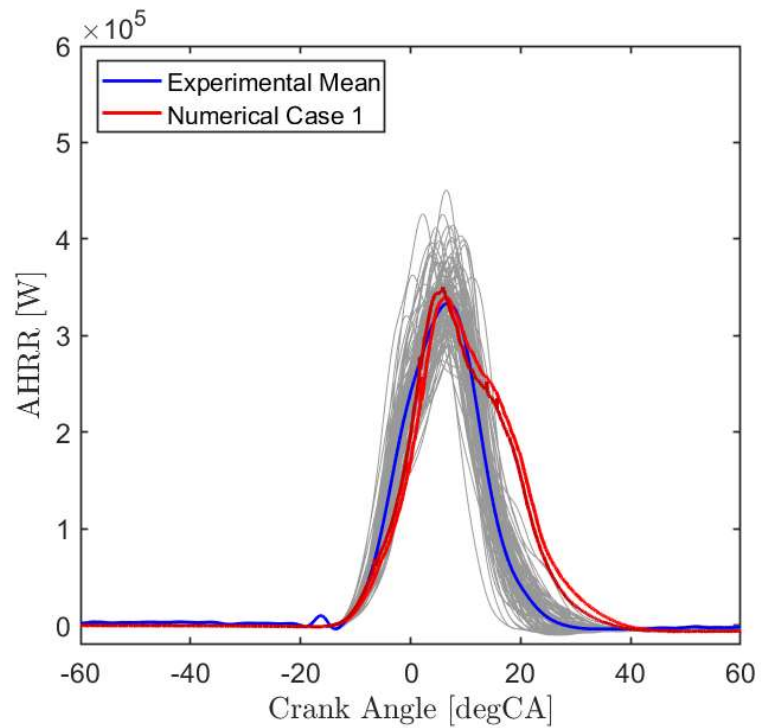


Figura 84 - Curva di AHRR caso T150

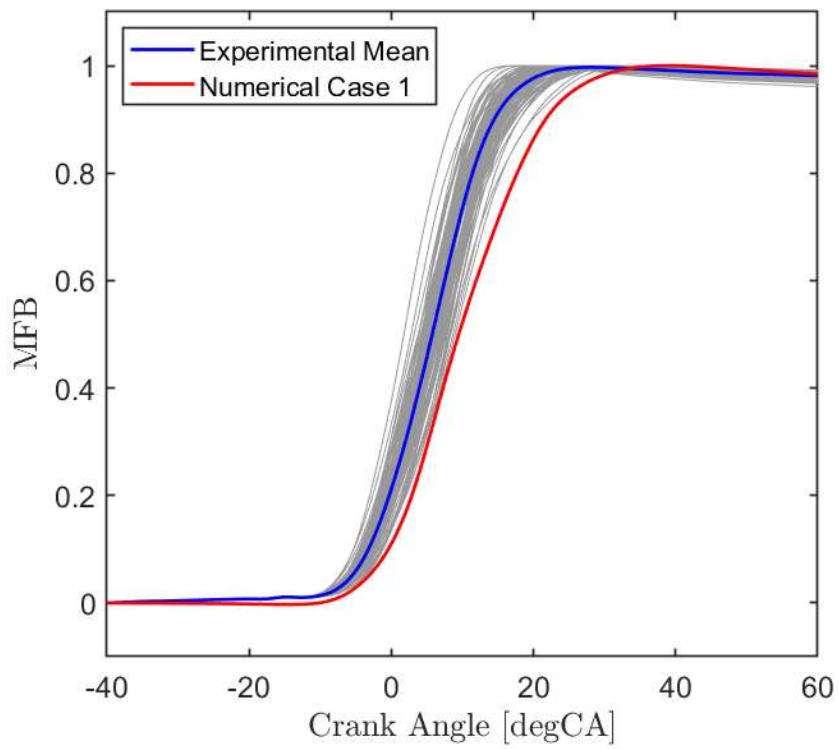


Figura 85 - Curva di MFB caso T150

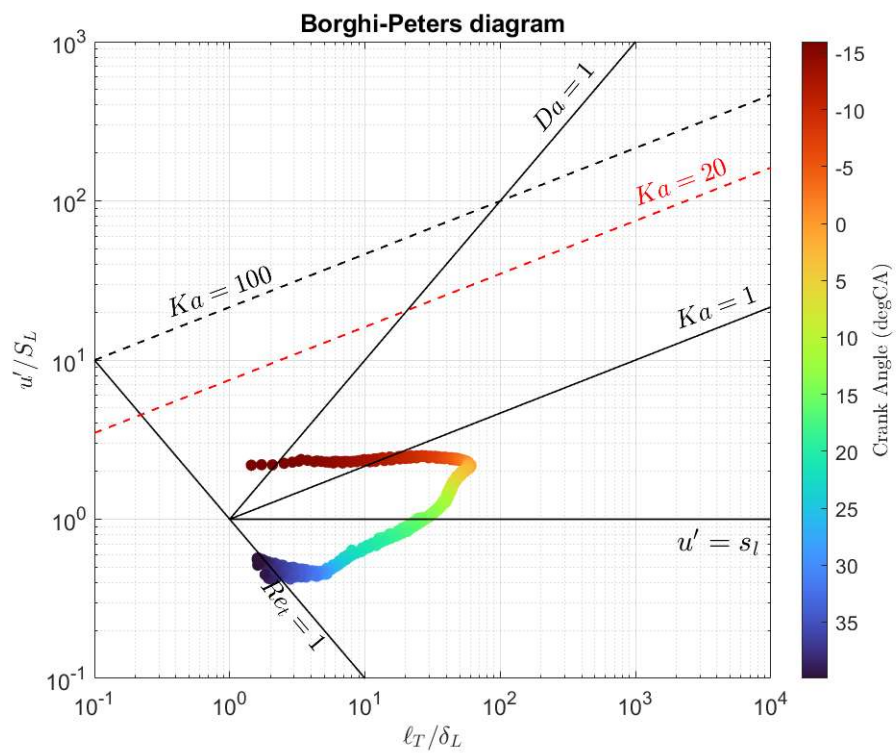


Figura 86 - Diagramma Borghi-Peters caso T150

Caso T152

Rapporto di equivalenza ϕ [-]	Frazione volumica di idrogeno xH_2 [-]	Parametro di calibrazione b_1 [-]	Anticipo di accensione S.A. [°CA]
1.0	0.60	1.3	-13

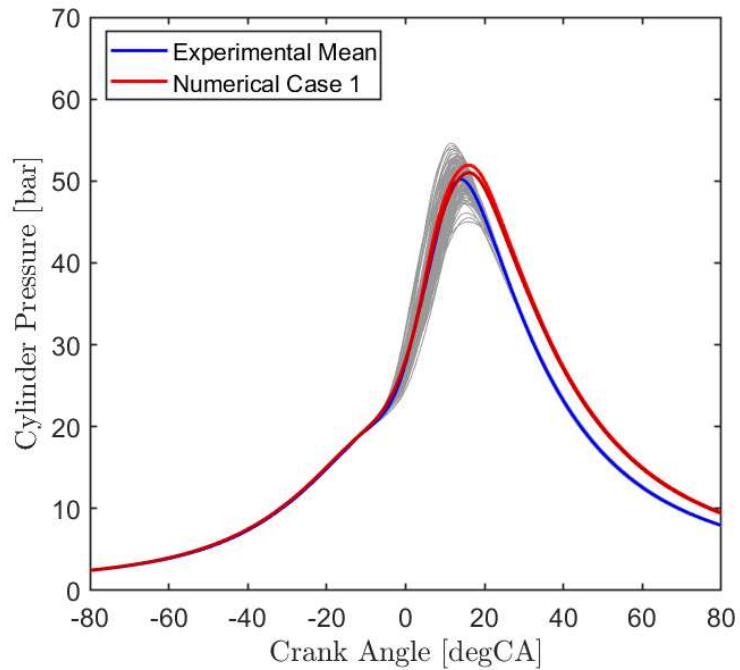


Figura 87 - Curva di pressione caso T152

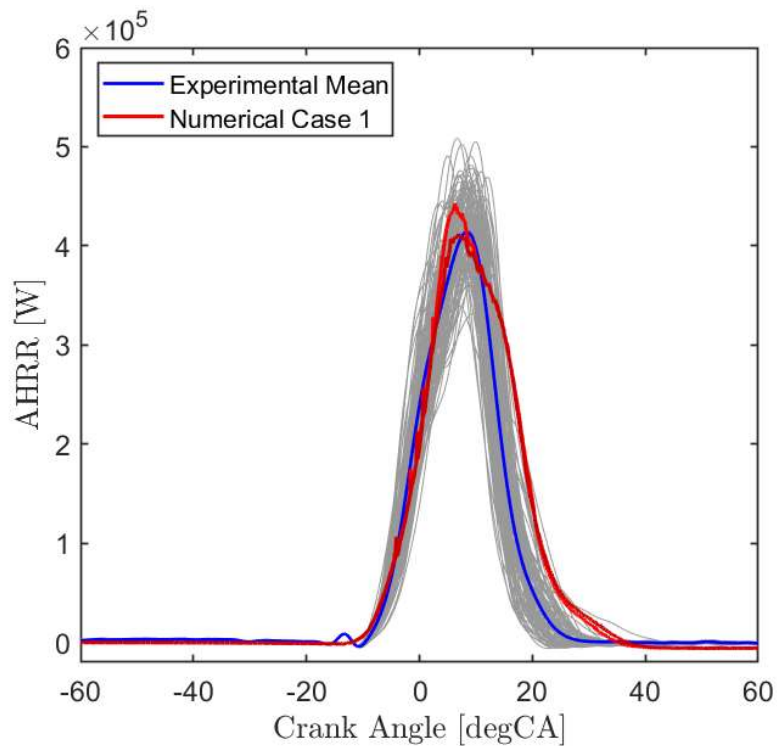


Figura 88 - Curva di AHRR caso T152

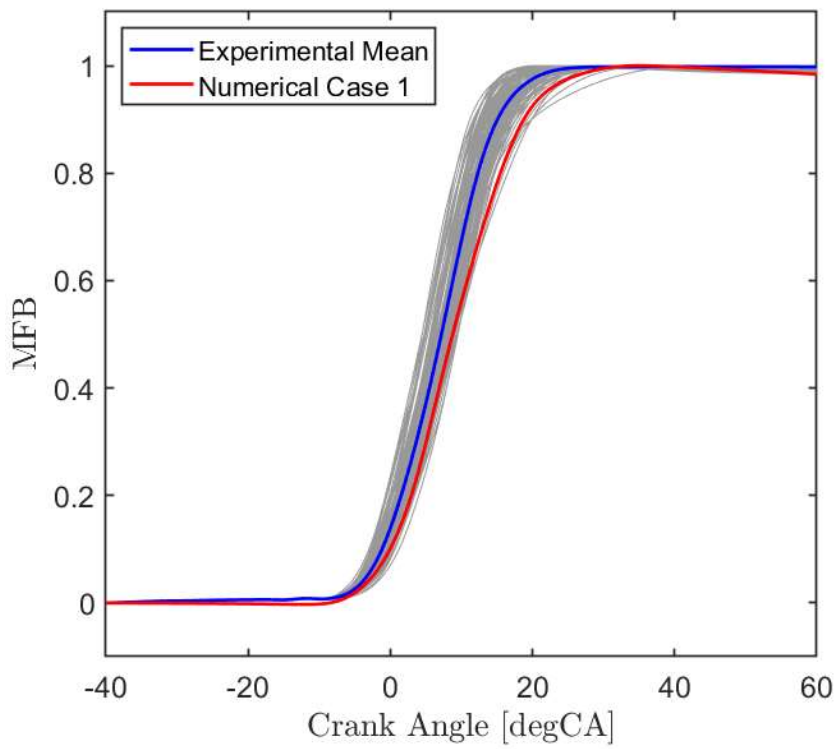


Figura 89 - Curva di MFB caso T152

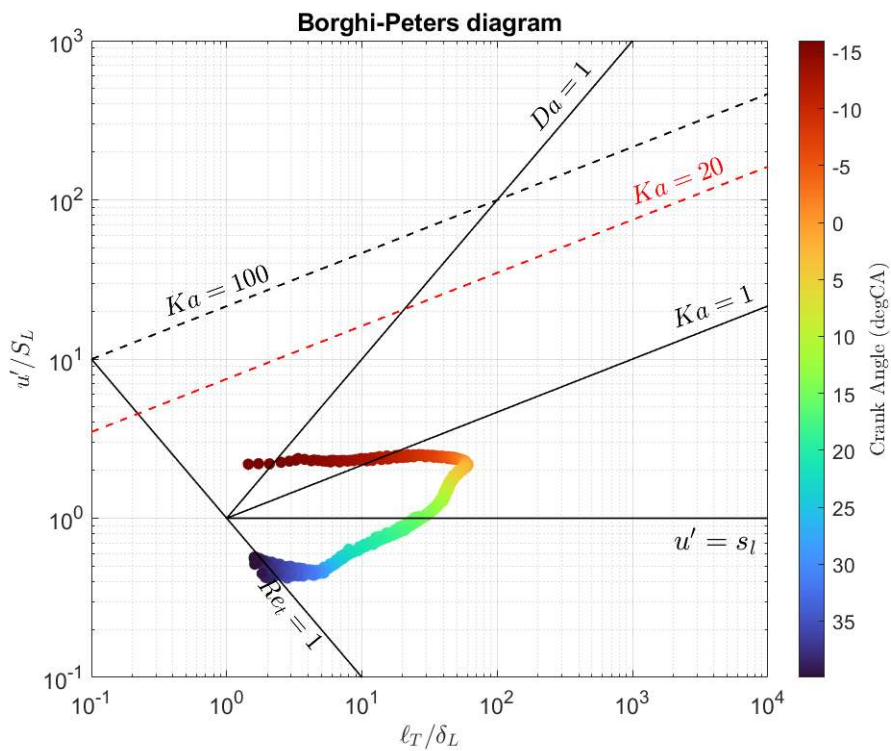


Figura 90 - Diagramma di Borghi-Peters caso T152

Conclusioni

La decarbonizzazione del settore dei trasporti rappresenta una delle principali sfide tecnologiche del panorama energetico attuale. In tale contesto, l'ammoniaca sta emergendo come promettente vettore energetico alternativo ai combustibili fossili. Il presente lavoro si è pertanto proposto di valutare le capacità del modello CFD G-Equation applicato alla simulazione della combustione di miscele di ammoniaca e idrogeno in un motore ad accensione comandata, al variare della composizione della miscela e del rapporto di equivalenza.

Confrontando i dati sperimentali e numerici in forma grafica è emerso che il modello è efficace. I risultati dimostrano una discreta predittività locale del modello, in quanto la variazione del parametro di calibrazione è ridotta o nulla a determinate condizioni. Nello specifico, nel caso di rapporto stechiometrico la variazione del parametro in funzione del volume di idrogeno è soddisfacente. Differentemente, sia al variare della quantità di idrogeno con miscele magre, sia al variare del rapporto di equivalenza stesso, è richiesta maggiore calibrazione. Inoltre, si mostra come la calibrazione puntuale fornisce una rappresentazione precisa e affidabile della combustione reale.

Per quanto riguarda le grandezze analizzate, le curve di pressione risultano correttamente riprodotte sull'intero intervallo di simulazione. Le curve di AHRR presentano uno scostamento variabile in funzione della frazione volumetrica di idrogeno, mentre le curve di MFB mostrano le criticità maggiori, con differenze non trascurabili rispetto ai dati sperimentali. La criticità più rilevante è stata riscontrata in prossimità del limite di stabilità della combustione, dove il parametro di calibrazione assume valori significativamente superiori rispetto agli altri casi esaminati, raggiungendo in un caso specifico un valore anomalo del tutto fuori dall'intervallo atteso.

I risultati ottenuti nel presente lavoro aprono la strada a diversi possibili sviluppi futuri. In primo luogo, sarebbe opportuno valutare l'adozione di un modello di velocità turbolenta alternativo, al fine di verificare se una formulazione differente consenta di migliorare la capacità predittiva del modello e di ridurre la dipendenza dalla calibrazione nelle condizioni in cui questa si è rivelata più critica. In secondo luogo, potrebbe

risultare d'interesse testare la G-equation in abbinamento a simulazioni di tipo LES (*Large Eddy Simulation*), approccio che potrebbe fornire una descrizione più fedele della struttura della fiamma turbolenta. Infine, un'analisi approfondita del caso T134 appare necessaria per individuare le cause del comportamento anomalo del parametro di calibrazione, il cui valore è risultato del tutto fuori dall'intervallo atteso. Tale indagine potrebbe contribuire a chiarire i limiti di applicabilità del modello in prossimità del limite di stabilità della combustione e a definire le condizioni operative entro cui G-equation risulta affidabile.

Riferimenti bibliografici

- [1] Depraiter, L., Goutte, S., *The role and challenges of rare earths in the energy transition*, Resources Policy 86, (2023)
- [2] R.L.Moss , E.Tzimas , H.Kara, P. Willis² and J.Kooroshy, *Critical Metals in Strategic Energy Technologies*, JRC – Institute for Energy and Transport, (2011)
- [3] Ramsha Akhter et al, *Mapping the Supply Chain of Lithium-Ion Battery Metals from Mine to Primary Processing by Country and Corporation*, Commodities, (2026)
- [4] Ayman M. Elbaz et al, *Review on the recent advances on ammonia combustion from the fundamentals to the applications*, Elsevier, Fuel communications, (2022)
- [5] A. Valera Medina et al, *Ammonia for power*, Elsevier, Progress in Energy and Combustion Science, (2018)
- [6] Lhuillier, C., Brequigny, P., Contino, F., & Mounaïm-Rousselle, C. *Experimental study on ammonia/hydrogen/air combustion in spark ignition engine conditions*. Fuel, 269, 117448. (2020).
- [7] Massimiliano Comotti et al, *Hydrogen generation system for ammonia–hydrogen fuelled internal combustion engines*, Elsevier, International journal for hydrogen energy, (2005)
- [8] Poinso, T., & Veynante, D., *Theoretical and Numerical Combustion*, Philadelphia: R.T. Edwards (2005).
- [9] Peters, N., *Turbulent Combustion*, Cambridge: Cambridge University Press (2004).
- [10] CONVERGE MANUAL, Convergent Science, December 17, (2024).
- [11] Ewald, J. and Peters, N., "A Level Set Based Flamelet Model for the Prediction of Combustion in Spark Ignition Engines," 15th International Multidimensional Engine Modeling Users Group Meeting, Detroit, MI, United States, (2005).
- [12] S.B. Pope, *CEQ: A Fortran library to compute equilibrium compositions using Gibbs function continuation*, (2003)
- [13] Jisoo Shin, Joohan Kim, Sreenath B. Gupta, *CFD modeling of near-wall combustion and unburned methane prediction in natural gas spark ignition engines*, Elsevier, Fuel 408, (2026).