

POLITECNICO DI TONINO

**Corso di Laurea Magistrale
in Ingegneria Meccanica**

Tesi di Laurea Magistrale

Sviluppo di un metodo numerico per la determinazione della velocità laminare di combustione in miscele metano/aria



Relatori:

Mirko **BARATTA**

Daniela **MISUL**

Candidato:

Riccardo **CIRULLI**

Ottobre, 2019

Abstract

Sviluppo di un metodo numerico per la determinazione della velocità laminare di combustione per miscele di metano/aria

di Riccardo CIRULLI

Il crescente interesse verso gli attuali problemi ambientali ha reso la riduzione delle emissioni inquinanti non più un'opzione ma una necessità. Interessanti risultati in termini di riduzione delle emissioni inquinanti per i motori ad accensione comandata possono essere ottenuti utilizzando combustibili alternativi. Il metano è considerato fra i più promettenti *clean fuel* per motori SI grazie alle sue notevoli proprietà chimico-fisiche, come elevata resistenza alla detonazione (NO pari a 120), ed elevato rapporto H/C, e quindi ridotte emissioni di CO₂. I principali contro di tale combustibile sono la bassa velocità di propagazione del fronte di fiamma e la sua scarsa capacità di bruciare in condizioni di miscela povera [1]; un modo per migliorare questo inconvenienti risulta essere l'aggiunta di idrogeno, grazie alla sua più elevata velocità di combustione (sette volte più alta in condizioni stechiometriche).

L'obiettivo principale di tale lavoro di tesi è stato la generazione di tabelle di combustione mediante l'utilizzo di LOGEresearch, software di simulazione di cinetica chimica del processo di combustione, per miscele di metano/aria con e senza addizione di idrogeno. Inoltre si è provveduto ad effettuare un confronto fra i due principali meccanismi di cinetica chimica, cioè *Aramco 2.0* e *GRImech3.0*, effettuando anche un confronto con i dati sperimentali di *laminar flame speed* presenti in letteratura. Durante il reperimento di tali dati sperimentali si è cercato anche di comprendere il motivo per cui ci fosse una grossa discrepanza fra dati sperimentali ottenuti a partire dalle stesse condizioni iniziali della miscela, focalizzando l'attenzione sui metodi *constant pressure* e *constant volume*. Una volta generate le tabelle di combustione, si è deciso di implementare quest'ultime su Converge, software di simulazione CFD, al fine di ottenere un ulteriore mezzo di confronto fra i due meccanismi di combustione. Il confronto è consistito nella simulazione di diversi punti di lavoro di dei motori PoliTo Engine e GasOn, confrontando le simulazioni con i trend rilevati sperimentalmente. Un altro importante obiettivo di tale lavoro di tesi è stato lo sviluppo di una correlazione che, fornite in input le condizioni della miscela (pressione, temperatura e percentuale di EGR), permettesse di calcolare il valore della *laminar flame speed*, per una miscela stechiometrica di metano/aria. Tale correlazione è stata ottenuta a partire dai dati numerici ottenuti con il meccanismo *Aramco 2.0*, cui è seguita una fase di analisi numerica e curve fitting dei dati a disposizione. Il fine principale è quello di permettere una simulazione più rapida, in virtù della riduzione dei costi computazionali, ma comunque accurata, del processo di combustione. Tale correlazione è stata quindi validata con i dati numerici stessi da cui è stata ricavata e con i dati sperimentali di *laminar flame speed* presenti in letteratura.

Ringraziamenti

Desidero ringraziare in primis i miei relatori Mirko Baratta e Daniela Misul per aver messo a disposizione del gruppo di ricerca le loro competenze, con i loro preziosi suggerimenti. Un grazie particolare va al gruppo di lavoro ed amici, PhD Prashant Goel e Silvestru Chiriches, con i quali ci si è confrontati su tutto il lavoro di tesi. Alla mia *famiglia*, senza la quale non sarebbe stato tutto possibile, ai miei *genitori*, a mio *fratello* e alle mie *sorelle*, va il grazie più grande e sincero. Un ringraziamento va al compagno di avventura Gaetano, con cui si è condivisa praticamente l'intera carriera universitaria, cui auguro sempre il meglio per il futuro a venire. A Teta, che mi ha sostenuto, ascoltato e consigliato va un grazie speciale. Grazie a tutti gli amici conosciuti nel gruppo di ricerca, ognuno di loro ha aggiunto qualcosa al mio bagaglio, grazie agli amici di sempre e tutti coloro che hanno contribuito al raggiungimento di questo obiettivo.

Indice

Abstract	iii
Ringraziamenti	v
1 Cenni sul fenomeno della combustione.....	1
1.1 Descrizione unidimensionale stazionaria	3
1.1.1 Entalpia di formazione.....	4
1.2 La relazione di Rayleigh.....	6
1.3 Relazione di Rankine-Hugoniot	7
1.4 Velocità di propagazione di fiamma laminare LFS	9
1.4.1 Dipendenza da temperatura e pressione di miscela	9
1.4.2 Dipendenza dalla dosatura della miscela.....	12
1.4.3 Dipendenza dalla frazione di gas combustibili nella miscela	14
1.5 Struttura del fronte di fiamma laminare	15
1.6 Effetti della dilatazione dei gas combustibili	17
1.7 Velocità turbolenta di propagazione del fronte di fiamma	18
1.8 Perché il metano?.....	19
1.8.1 Miscele di metano ed idrogeno.....	20
2 Metodi di misurazione della LFS	22
2.1 LFS.....	22
2.2 Fiamma di Bunsen	24
2.3 Counterflow/Stagnation Flame Technique	25
2.4 Heat flux method	26
2.5 Bomba sferica e cilindrica	27
2.5.1 Constant pressure method/Unconfined Method	28
2.5.2 Constant Volume Method/Confined Method	29
2.6 Analisi dei dati sperimentali.....	30
2.6.1 Effetto del confinamento cilindrico sulla propagazione del fronte di fiamma [13].....	30
2.6.2 Elia et al. Constant volume method.....	31
2.6.3 Lowry et al. Constant Pressure Method.....	34
2.6.4 Confronto fra i due metodi sperimentali.....	37
2.6.5 Conclusioni.....	38
3 Cinetica chimica: impostazione delle simulazioni e risultati	40
3.1 LOGE research	40
3.2 Creazione della libreria con LOGEresearch	40

3.3	Confronto fra i meccanismi Aramco 2.0 e GRI-mech 3.0	43
3.3.1	Validazione dei risultati con i meccanismi Aramco 2.0 e GRI-mech 3.0.....	43
4	GASON correlation	47
4.1	Stato dell'arte delle correlazioni.....	47
4.2	Curve fitting cenni	52
4.2.1	Linear least squares	53
4.2.2	Weighted linear least squares	55
4.2.3	Robust Least Squares.....	55
4.2.4	Nonlinear Least Squares	55
4.2.5	Goodness of Fit Statistics	56
4.3	“GASON” correlation	57
4.4	Validazione della correlazione “GASON”	62
4.4.1	Analisi del residuo.....	64
4.4.2	Risultati della correzione sulla correlazione “GASON”.....	65
4.4.3	Range di utilizzo della correlazione “GASON”	68
4.4.4	Futuri lavori sulla correlazione: <i>machine learning</i>	73
5	Validazione CFD con CONVERGE.....	74
5.1	PoliTo Engine.....	74
5.2	Setup numerico di Converge	75
5.3	LFS su Converge	76
5.4	PoliTo Engine: 2000 × 6 imep	77
5.5	PoliTo Engine: 3000 × 8 imep EGR = 10%	78
6	Conclusioni.....	80
	Bibliografia.....	82

Elenco delle figure

Figura 1.1: Andamento della velocità di deflagrazione, somma di "Transport velocity" ed di "Burning velocity"	1
Figura 1.2: Andamento della velocità di propagazione laminare al variare del rapporto di equivalenza, per diverse tipologie di combustibile [4].	2
Figura 1.3: Effetto della turbolenza sul corrugamento e spessore del fronte di fiamma [5].....	3
Figura 1.4: Rappresentazione schematica di un tubo adiabatico ed impermeabile, in grigio è indicato il fronte di fiamma [2]	3
Figura 1.5: Effetto dell'acqua in fase liquida o gassosa fra i prodotti di combustione (combustione a $V=\text{cost}$ con T_{finale} uguale a T_{iniziale}) [2]	5
Figura 1.6: Rappresentazione di due rette di Rayleigh [2]	6
Figura 1.7: Linea continua-Curva di Rankine Hugoniot. Retta tratteggiata- Retta di Rayleigh [2].....	8
Figura 1.8: Ampliamento della zona ombreggiata, non avente significato fisico [2].....	8
Figura 1.9: Esempio di prereazioni che coinvolgono la molecola di metano [4]	10
Figura 1.10: Rappresentazione grafica dell'energia di attivazione di una generica reazione	11
Figura 1.11: Andamenti sperimentali della LFS al variare della pressione, per una miscela stechiometrica di metano a 298 K e 470 K [7]	11
Figura 1.12: Dipendenza della temperatura di miscela sulla velocità laminare per diverse tipologie di combustibile [2].....	12
Figura 1.13: Rappresentazione grafica dell'equazione (1.18), per diverse tipologie di combustibili ossigenati [4]	13
Figura 1.14: Andamento della LFS al variare del rapporto di equivalenza [4]	14
Figura 1.15: Andamento della LFS per diversi valori di diluizione per 4 differenti diluenti. La miscela in considerazione è una miscela stechiometrica di metano ed aria al $T=393$ K e $p=0.1$ Mpa [8].	15
Figura 1.16: Andamento spaziale della temperatura in una fiamma premiscelata unidimensionale [2]	16
Figura 1.17: Andamento delle concentrazioni di diverse specie chimiche coinvolte durante la combustione del metano [5].....	17
Figura 1.18: Rappresentazione grafica di 3 diversi step di propagazione del fronte di fiamma [4].....	17
Figura 1.19: Andamento della frazione di massa bruciata in funzione della frazione volumica bruciata [4] .	18
Figura 1.20: Andamento della coppia relativa al variare dell'anticipo di accensione [6]	19
Figura 1.21: Andamento delle pressioni in camera per diverse miscele di metano ed idrogeno. A sinistra 2000 rpm a pieno carico, a destra 3000 rpm a carico parziale [1].....	21
Figura 2.1: Caso pratico cui ci si vuole ricondurre per la determinazione della velocità laminare [2]	22
Figura 2.2: Esempio della dispersione dei dati sperimentali [9]	23
Figura 2.3: Dispersione dei dati sperimentali per la misurazione della LFS per una miscela di aria e metano a temperatura ambiente e per diversi valori di pressione e rapporto di equivalenza [7]	23
Figura 2.4: Misurazioni della laminar flame speed con la stessa configurazione counterflow ed in condizioni molto simili [9]	24
Figura 2.5: Becco di Bunsen [10].....	25
Figura 2.6: Twin flame configuration.....	26
Figura 2.7: Procedura di estrapolazione per il calcolo della LFS a partire dai dati sperimentali [9]	26
Figura 2.8: Schema generale del metodo Heat Flux.....	27
Figura 2.9: Possibili utilizzi di una bomba sferica per il calcolo della LFS. A destra Constant Volume Method. A sinistra Constant Pressure Method [11]	28
Figura 2.10: Sequenze di propagazione del fronte di fiamma all'interno di una camera sferica, riprese con una fotocamera Shilieren. La miscela in esame è una di n-eptano con $\Phi=1.2$ e $T=353$ K, timestep pari a 2.25 ms.	29

Figura 2.11: Confronto fra un fronte di fiamma liscio ed un fronte di fiamma corrugato per una miscela metano/aria $\phi=1$, $T=300$ K $p=1$ atm (sinistra) $p=5$ atm (destra) a study on spherical expanding flame bla bla	29
Figura 2.12: Effetto del confinamento cilindrico durante i vari step di propagazione del fronte di fiamma [13]	31
Figura 2.13: Rappresentazione schematica della bomba sferica utilizzata da Elia [14]	31
Figura 2.14: Calore uscente dal sistema normalizzato rispetto all'energia derivante dalla combustione, durante gli ultimi step di propagazione del fronte di fiamma [14]	33
Figura 2.15: Evoluzione della temperatura in camera durante per diversi istanti di propagazione del fronte di fiamma per una miscela stechiometrica di metano/aria [11]	33
Figura 2.16: Andamento del flame stretch rate al variare del raggio del fronte di fiamma normalizzato, per una miscela stechiometrica di metano/aria a $P_i=1$ atm e $T_i=298$ K [14]	34
Figura 2.17: Apparato sperimentale utilizzato da Lowry con high speed camera Shlieren [15]	35
Figura 2.18: Posizione del fronte di fiamma rispetto all'andamento della pressione in camera.	35
Figura 2.19: Andamento della pressione in camera per diversi istanti di propagazione del fronte di fiamma. Andamenti ottenuti mediante una simulazione two-zone della combustione in camera sferica, di una miscela di metano/aria, stechiometrica ed a NTP [11]	36
Figura 2.20: Rappresentazione del residuo durante la propagazione del fronte di fiamma [15]	37
Figura 3.1: Struttura di un gas phase data file	41
Figura 3.2: Esempio di molecular phase data file	42
Figura 3.3: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH ₄ /aria a $p=1$ atm, EGR=0% e $T=298$ K	44
Figura 3.4: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH ₄ /aria a $p=5$ atm, EGR=0% e $T=298$ K	44
Figura 3.5: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH ₄ /aria a $p=10$ atm, EGR=0% e $T=298$ K	45
Figura 3.6: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH ₄ /aria a $p=20$ atm, EGR=0% e $T=298$ K	45
Figura 4.1: Risultati ottenuti da Metghalchi e Keck. Andamento dei coefficienti α e β al variare della dosatura relativa per diverse tipologie di combustibile	48
Figura 4.2: Confronto fra differenti correlazioni per α al variare di ϕ	50
Figura 4.3: Confronto fra differenti correlazioni per β al variare di ϕ	50
Figura 4.4: Rappresentazione grafica della funzione di costo J nel caso di funzione interpolante di tipo $y=w+bx$	54
Figura 4.5: Descrizione grafica della definizione del coefficiente R-square, in rosso SST, in blu SSE	56
Figura 4.6: Rappresentazione della main-function nel caso di miscela stechiometrica di CH ₄ /aria, a $p=1$ atm, EGR=0 al variare della T_i	57
Figura 4.7: Rappresentazione grafica delle curve, definite dalla (4.28), interpolanti i valori di LFS per diversi valori di pressione al variare della temperatura e per EGR=0% e $\phi=1$ [-]	58
Figura 4.8: Schermata del toolbox Curve Fitting con relativi andamenti dei coefficienti a, b e c al variare della pressione	58
Figura 4.9: Schema rappresentativo della matrice tridimensionale dei coefficienti	59
Figura 4.10: Step per l'utilizzo della correlazione GasOn	61
Figura 4.11: Rappresentazione 3D della correlazione GasOn per una miscela metano aria stechiometrica con EGR=0%	62
Figura 4.12: Confronto fra correlazione "GASON" e dati sperimentali. CH ₄ /aria, $\phi=1$, $T=298/472$ K	62
Figura 4.13: Confronto fra i dati sperimentali ed i risultati ottenuti mediante le simulazioni numeriche con LOGE ed il meccanismo Aramco 2.0	63

Figura 4.14: Confronto fra dati ottenuti mediante simulazioni numeriche con LOGE, e la correlazione "GASON"	63
Figura 4.15: Analisi del residuo a $p=1$ bar, $EGR=0\%$, $\phi=1$	64
Figura 4.16: Analisi del residuo a $p=10$ bar, $EGR=0\%$, $\phi=1$	64
Figura 4.17: Analisi del residuo a $p=160$ bar, $EGR=0\%$, $\phi=1$	65
Figura 4.18: Effetto della correzione sulla correlazione "GASON" a $p=1$ bar, $EGR=0\%$ e $\phi=1$ al variare della T	66
Figura 4.19: Effetto della correzione sulla correlazione "GASON" a $p=10$ bar, $EGR=0\%$ e $\phi=1$ al variare della T	66
Figura 4.20: Effetto della correzione sulla correlazione "GASON" a $p=160$ bar, $EGR=0\%$ e $\phi=1$ al variare della T	67
Figura 4.21: Confronto fra correlazione corretta (sotto) e non corretta (sopra)	67
Figura 4.22: Confronto fra correlazione corretta e punti ottenuti per simulazione numerica con LOGE	68
Figura 4.23 : Confronto fra dati numerici e correlazione con banda di errore del $\pm 6\%$	68
Figura 4.24: Andamento di pressione, frazione di massa bruciata, temperatura dei gas combusti ed incombusti, durante la fase di combustione	69
Figura 4.25: Confronto fra ciclo di pressione con combustione (blu) e senza combustione "motored" (rosso)	70
Figura 4.26: Confronto fra correlazione e dati sperimentali per $EGR=0\%$, $\phi=1$	71
Figura 4.27: Confronto fra correlazione e dati numerici per $p=60$ bar, $EGR=10\%$ e $\phi=1$	71
Figura 4.28: Confronto fra correlazione e dati numerici per $p=60$ bar, $EGR=20\%$ e $\phi=1$	72
Figura 4.29: Confronto fra correlazione e dati numerici per $p=60$ bar, $EGR=30\%$ e $\phi=1$	72
Figura 5.1: POLITO Engine	74
Figura 5.2: Interazione distruttiva fra vortici e fronte di fiamma [10]	76
Figura 5.3: Confronto dell'andamento della pressione in camera, al variare dell'angolo di manovella, per il punto di lavoro 2000x6 del Polito Engine con $EGR=0\%$	77
Figura 5.4: Dettaglio della fase di combustione ottenuta mediante simulazione CFD con Converge, e segnale sperimentale.....	78
Figura 5.5: Confronto dell'andamento degli andamenti delle pressioni in camera ottenuti con i meccanismi Aramco 2.0 e GRI.mech 3.0.....	78
Figura 5.6: Confronto fra gli andamenti della LFS durante due cicli motore, per entrambi i meccanismi in esame	79

Elenco delle tabelle

Tabella 1.1: Limiti di infiammabilità per alcune tipologie di combustibili [2].....	14
Tabella 1.2: Temperatura di ignizione per diversi combustibili in condizioni stechiometriche ed a pressione ambiente [2]	16
Tabella 1.3: Confronto fra metano ed idrogeno [1]	20
Tabella 2.1: Confronto di range operativi e metodi di misura di Elia e Lowry	30
Tabella 2.2: Confronto fra i due metodi sperimentali in analisi.....	38
Tabella 3.1: Range di variabilità dei parametri con cui sono state eseguite le simulazioni	40
Tabella 3.2: Confronto fra i meccanismi Aramco 2.0 e GRI3.0	43
Tabella 4.1: Coefficienti ottenuti da Metghalchi et al. per diverse tipologie di combustibili	48
Tabella 4.2: Confronto fra i coefficienti ottenuti da diversi autori in merito alla correlazione in equazione (4.10)	50
Tabella 4.3: Tabella riassuntiva delle principali correlazioni presenti in letteratura.....	52
Tabella 4.4: Esempio di matrice dei coefficienti nel caso di EGR=0%	58
Tabella 4.5: Tabella riassuntiva per il terzo step	59
Tabella 4.6: schema della matrice dei coefficienti per a	60
Tabella 4.7: schema della matrice dei coefficienti per b	60
Tabella 4.8: schema della matrice dei coefficienti per c	60
Tabella 4.9: Coefficienti delle correlazioni per il coefficiente a	60
Tabella 4.10: Coefficienti delle correlazioni per il coefficiente b	61
Tabella 4.11: Coefficienti delle correlazioni per il coefficiente c	61
Tabella 5.1: Caratteristiche principali del POLITO Engine	74
Tabella 5.2: Setup numerico di Converge	75
Tabella 5.3: Caratteristiche della mesh nel PoliTo Engine	76
Tabella 5.4: Tabelle di combustione generate con la correlazione GasOn.....	77

1 Cenni sul fenomeno della combustione

La combustione consta di una serie di reazioni chimiche di ossidazione di un combustibile da parte di un comburente (che è tipicamente rappresentato dall'ossigeno presente nell'aria), con sviluppo di calore e radiazioni elettromagnetiche, tra cui anche radiazioni luminose. La combustione è molto spesso accompagnata anche dalla presenza di una fiamma e dalla produzione di gas ad elevata temperatura prodotti dalla combustione, che disperdendo al loro interno polveri ottenuti dalla combustione (in genere particelle carboniose), danno origine al fumo [2].

In altre parole, la combustione è una reazione di ossidoriduzione esotermica, in quanto un composto si ossida mentre un altro si riduce (ad esempio nel caso della combustione degli idrocarburi, il carbonio si ossida mentre l'ossigeno si riduce), con rilascio di energia e formazione di nuovi composti (generalmente acqua ed anidride carbonica). È possibile effettuare diverse classificazioni del processo di combustione, infatti le reazioni fra combustibile e comburente possono avvenire secondo diverse modalità [2] :

- **Senza fiamma:** in tal caso la reazione risulta essere molto lenta e si sviluppa a temperature particolarmente basse (500-600°C) con tempi di reazione che possono arrivare anche alla decina di secondi.
- **Con fiamme deflagranti (o deflagrazione):** in tale caso (di particolare interesse per applicazioni ingegneristiche) l'80% delle reazioni avviene all'interno dello spessore di fiamma, con tempi di reazione inferiori al millisecondo. Per quanto riguarda la velocità del fronte di fiamma, quest'ultimo ha velocità di avanzamento dell'ordine dei 20-30 m/s. Durante tale tipologia di combustione si ha un abbassamento di densità e pressione della zona occupata dai prodotti della combustione, tale diminuzione di densità provoca un incremento della velocità di propagazione del fronte, in quanto questo viene anche *sospinto* dall'espansione dei gas combusti (in Figura 1.1 indicata con Transport Velocity).[3]

Tale abbassamento di pressione risulta essere una frazione trascurabile della pressione media nel dominio in cui ha luogo la combustione, tanto da poter definire la deflagrazione un processo *quasi isobarico*, cioè le variazioni di pressione attraverso il dominio sono trascurabili rispetto a quelle di temperatura o energia cinetica.

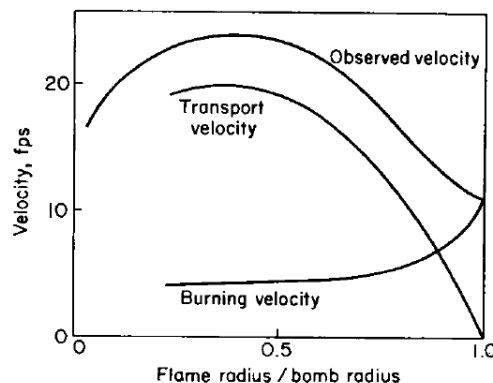


Figura 1.1: Andamento della velocità di deflagrazione, somma di "Transport velocity" ed di "Burning velocity"

- **Con fiamme detonanti (o detonazione):** In tal caso le velocità di propagazione del fronte di fiamma diventano particolarmente elevate, raggiungendo anche valori di 1000 m/s, con la conseguente formazione di onde d'urto. Tale fenomeno si verifica quando si ha un'autoaccensione contemporanea di tutta la massa della miscela presente, che non richiede una propagazione ma una detonazione di tutta la massa presente nel dominio in considerazione. Volendo confrontare la deflagrazione con la detonazione, in quest'ultimo caso si ha, al contrario, un aumento di pressione e di densità, e quindi una decelerazione del fronte di fiamma. Anche l'andamento della pressione risulta essere completamente diverso, nel caso di deflagrazione possiamo assumere che non ci sia un gradiente di

pressione (pur attraversando il fronte di fiamma); nel caso di detonazione (od esplosione) si avrà non solo il tipico andamento a gradino del profilo di temperatura nell'attraversare il fronte di fiamma, ma ci sarà anche un gradino di pressione. Quest'ultima tipologia di fiamma non risulta di particolare interesse tecnico nell'ambito delle macchine [2].

Un'altra possibile classificazione delle fiamme può essere fatta distinguendole in fiamme laminari e turbolente:

- **Fiamme laminari:** sono caratterizzate da avere un fronte di fiamma ben definito e con una superficie regolare; le velocità di propagazione del fronte di fiamma risultano essere particolarmente basse, da 0.1-0.4 m/s (considerando come condizioni iniziali di temperatura e pressione, quelle ambiente). In Figura 1.2 è possibile notare l'andamento della velocità di propagazione laminare per diverse tipologie di combustibili, al variare del rapporto di equivalenza ϕ [4]. Per quanto riguarda lo spessore del fronte di fiamma laminare risulta essere compreso fra 0.05-0.20 mm (in molte modelli lo spessore viene trascurato, suddividendo il dominio in una zona occupata da gas combusti ed un'altra da gas incombusti) [2].

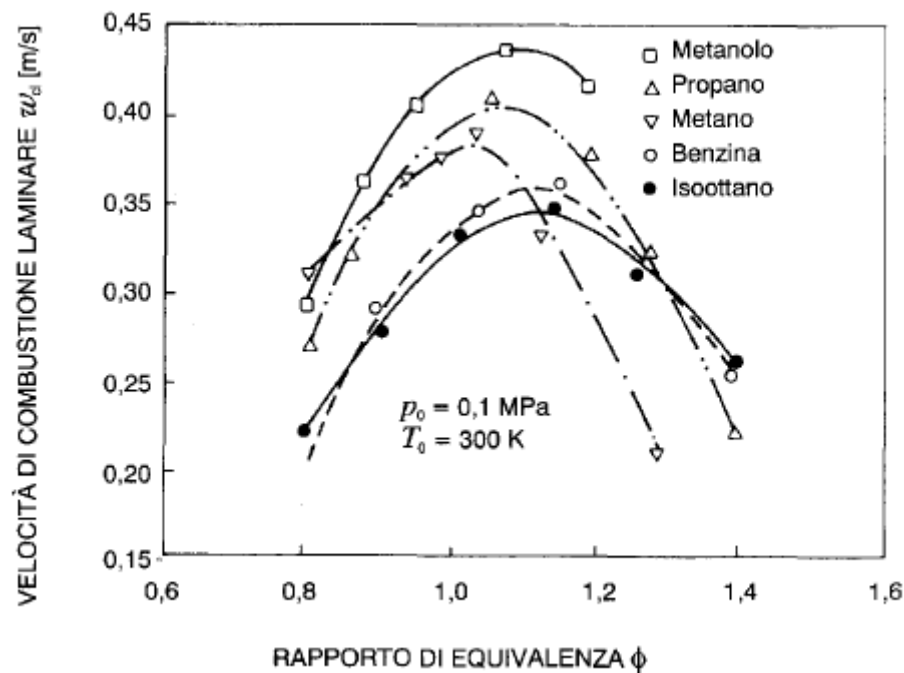


Figura 1.2: Andamento della velocità di propagazione laminare al variare del rapporto di equivalenza, per diverse tipologie di combustibile [4].

- **Fiamme turbolente,** in questa tipologia di fiamme, la zona della fiamma è ancora identificabile ma il fronte di fiamma risulta essere corrugato ed irregolare. L'incremento della superficie del fronte di fiamma, dovuto ai moti turbolenti, comporta un incremento della velocità di propagazione del fronte di fiamma, in tal caso le velocità possono arrivare a raggiungere i 5-30 m/s crescenti con l'intensità di turbolenza. Per quanto riguarda lo spessore del fronte di fiamma turbolento, questo è compreso fra 3 e 9 mm, quindi non risulta più trascurabile come nel caso di spessore di fronte di fiamma laminare [2]. Dalla Figura 1.3 è possibile apprezzare la differenza dello spessore di fiamma turbolenta e laminare [5].

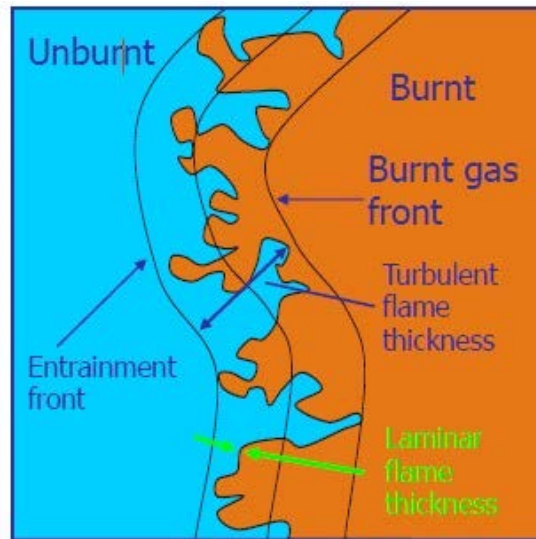


Figura 1.3: Effetto della turbolenza sul corrugamento e spessore del fronte di fiamma [5]

Le fiamme laminari e turbolente, è possibile classificarle a loro volta in:

- **Fiamme diffusive:** in tale tipologia di fiamma il comburente ed il combustibile sono introdotti separatamente. Quindi prima che le reazioni chimiche fra i reagenti abbiano inizio, c'è bisogno che il combustibile si trovi allo stato gassoso, c'è bisogno, inoltre, che ci siano un miscelamento fra i vari reagenti. Un esempio pratico di tale tipologia di fiamma è quello della candela, mentre un esempio pratico è la combustione nei motori ad accensione spontanea [2].
- **Fiamme premiscelate:** in questa tipologia di fiamma la combustione avviene dopo un miscelamento fra combustibile e comburente, anche in questo caso un esempio pratico può essere quello del fornello di casa, mentre uno tecnico può essere la combustione di benzina o metano nei motori ad accensione comandata [2].

1.1 Descrizione unidimensionale stazionaria

Per studiare i vari processi della combustione è utile partire da un caso pratico abbastanza semplice, cioè una configurazione unidimensionale e stazionaria. A tal proposito, si consideri un fronte di fiamma che si propaga all'interno di un tubo adiabatico, impermeabile ed avente una sezione trasversale fissa, al cui interno è presente una miscela di aria e combustibile in condizioni stechiometriche. L'attrito fra il fluido e le pareti è trascurato ed il profilo di velocità descritto dal fluido è costante e pari ad u . Nelle sezioni di ingresso ed uscita, sufficientemente lontano dal luogo in cui ha, eventualmente, luogo la combustione, si può assumere che tutti i flussi e diffusivi delle grandezze primitive e tutti i gradienti (ad esempio di concentrazione massica, di temperatura, di pressione...) siano identicamente nulli, in tal modo le loro derivate spaziali saranno nulle. Nella Figura 1.4 con 1 sono state indicate le condizioni di ingresso e con 2 quelle di uscita [2].



Figura 1.4: Rappresentazione schematica di un tubo adiabatico ed impermeabile, in grigio è indicato il fronte di fiamma [2]

A questo punto è possibile scrivere le equazioni di conservazione di massa, quantità di moto (non essendoci forze esterne applicate, quest'ultima si conserverà) ed entalpia totale per questo sistema appena descritto.

Conservazione della massa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (1.1)$$

Conservazione della quantità di moto:

$$\frac{\partial(\rho \bar{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} \bar{v}) + \nabla \cdot J_v = -\nabla p \quad (1.2)$$

Conservazione dell'entalpia totale:

$$\frac{\partial(\rho h^{tot})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{v} h^{tot}) + \nabla \cdot J_{h^{tot}} = 0 \quad (1.3)$$

Sotto le ipotesi adottate di stazionarietà ed unidimensionalità fatte precedentemente, le 3 equazioni precedenti possono semplificarsi, ed integrando la variabile x dalle condizioni di ingresso a quelle di uscita, è possibile ottenere:

$$\dot{M} = \rho_1 u_1 = \rho_2 u_2 \quad (1.4)$$

$$I = \rho_1 u_1^2 + p_1 = \rho_2 u_2^2 + p_2 \quad (1.5)$$

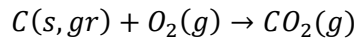
$$h^{tot} = \frac{u_1^2}{2} + h_1^s + h_1^0 = \frac{u_2^2}{2} + h_2^s + h_2^0 \quad (1.6)$$

Quindi la portata massica $\dot{M}$ per unità di superficie del fronte di fiamma, l'impulso I e l'entalpia totale h^{tot} sono uguali nelle sezioni di ingresso ed uscita. Sotto queste ipotesi, si vuole conoscere lo stato finale, note le condizioni nella sezione di ingresso. Le incognite che dovranno essere determinate sono 5 in totale, cioè: la densità, la pressione, l'entalpia sensibile, l'entalpia di formazione h^0 e la velocità di propagazione u . Per chiudere il problema abbiamo bisogno pertanto di altre due equazioni, una quarta relazione è quella dell'equazione di stato dei gas perfetti, quindi l'entalpia sensibile potrà essere espressa in funzione della temperatura, la quale a sua volta è correlabile alla densità e pressione per mezzo dell'equazione di stato dei gas perfetti.

Un'approssimazione che si potrebbe fare è quella di assumere che la differenza fra l'entalpia di formazione finale ed iniziale sia pari al potere calorifico del combustibile (considerando quindi una completa reazione di ossidazione del combustibile).

1.1.1 Entalpia di formazione

L'entalpia di formazione h^0 , avente unità di misura in $[J/kmol]$, di un generico composto chimico, è la variazione di entalpia relativa alla reazione che produce una mole del composto, a partire dagli elementi costituenti nei loro stati stabili, tutti considerati in condizioni standard. Solitamente allo stato standard (pressione 1 atm e temperatura di 25°C) agli elementi di reazione è associato un valore di entalpia di formazione nullo, questo perché non è necessario nessun altro cambiamento per portarli alle condizioni standard. Solitamente le entalpie di formazione sono tabulate in funzione della temperatura per tutte le principali specie chimiche che compaiono nelle reazioni più comuni, mentre per i composti inorganici si ricorre ad un database di tabelle termodinamiche (JANAF). Ad esempio all'ossigeno in condizioni di equilibrio (O_2) ed in condizioni standard è associato un valore di Δh^0 pari a 0 MJ/kmol, mentre alla CO_2 un valore di -393.52 MJ/kmol. Questo perché se si considera la seguente reazione che porta alla produzione di CO_2 :



In questo caso bruciando in atmosfera standard (quindi a 25°C) una mole di carbonio (grafite), con una mole di ossigeno, si ottiene una mole di anidride carbonica, inoltre tale reazione risulta essere esotermica, e quindi in tal caso $\Delta h^0 = -393.52 \text{ MJ/kmol}$. Quindi se l'entalpia di formazione è negativa, vuol dire che tale specie viene prodotta da una reazione esotermica, nel caso in cui sia positiva, verrà prodotta da una reazione endotermica. Quindi, per una generica reazione di combustione, l'entalpia dei prodotti considerati allo stato standard è data da:

$$H_{PROD}^0 = \sum_{prodotti} n_i \Delta h_{f,i}^0 \quad (1.7)$$

Mentre l'entalpia dei reagenti, sempre allo stato standard è pari a:

$$H_{REAG}^0 = \sum_{reagenti} n_i \Delta h_{r,i}^0 \quad (1.8)$$

Ed applicando la legge di Hess si ottiene:

$$\begin{aligned} H_{PROD}^0 - H_{REAG}^0 &= \Delta H(T_0)_p = -H_p(T_0) \\ &= -(\text{Potere calorifico a pressione } p \text{ e temperatura } T_0) \end{aligned} \quad (1.9)$$

1.1.1.1 Esempio combustione metano

Considerando come esempio pratico quello della combustione del metano, si ha che esso segue la seguente reazione, (con una serie di reazioni intermedie che coinvolgono diverse specie intermedie):



Quindi l'entalpia dei prodotti, supponendo l'acqua allo stato gassoso, sarà pari a:

$$H_{PROD}^0 = -393.52 + 2(-241.83) = -877.18 \text{ MJ}/(\text{kmol } CH_4)$$

Mentre per i reagenti si avrà:

$$H_{REAG}^0 = -74.87 + 2(0) = -74.87 \text{ MJ}/(\text{kmol di } CH_4)$$

Quindi il potere calorifico del metano in condizioni standard ($p=1 \text{ atm}$ e $T=25^\circ\text{C}$), risulta essere pari a:

$$-\Delta H^0 = 802.31 \text{ MJ}/(\text{kmol di } CH_4)$$

A questo punto, sapendo che la massa molare del metano è di 16.04 g/mol , è possibile esprimere il potere calorifico in unità di misura più comode, cioè MJ/kg , infatti:

$$-\Delta H^0 = \frac{802.31 \text{ MJ}}{16.04 \text{ kg}} = 50.02 \frac{\text{MJ}}{\text{kg}} \quad (\text{potere calorifico inferiore})$$

L'ultima osservazione riguarda il fatto che si è assunto che l'acqua si trovi allo stato gassoso, nel caso in cui avessimo assunto che si trovasse allo stato liquido avremmo ottenuto un potere calorifico di valore maggiore (potere calorifico superiore), perché avremmo recuperato una parte di energia anziché utilizzarla per trasformare acqua dallo stato liquido a gassoso. Di conseguenza la differenza fra potere calorifico superiore ed inferiore, in questo caso, è data dall'energia di vaporizzazione dell'acqua alla temperatura e pressione dei prodotti. In Figura 1.5 si vuole mettere in evidenza la non trascurabilità fra potere calorifico superiore ed inferiore, in particolare riferito ad una combustione a volume costante non adiabatica verso l'esterno, con temperatura finale uguale a quella iniziale. Nel caso di combustione a pressione costante, la differenza fra i due poteri calorifici sarebbe stata pari a $\Delta h_{vap} m_{H_2O}$

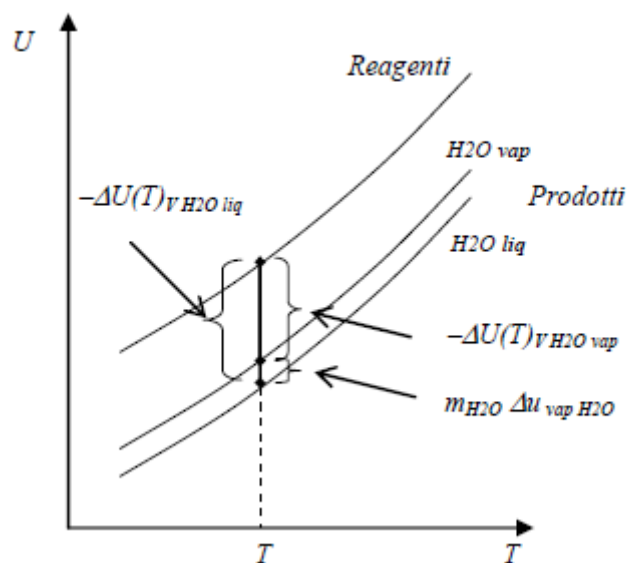


Figura 1.5: Effetto dell'acqua in fase liquida o gassosa fra i prodotti di combustione (combustione a $V=\text{cost}$ con T_{finale} uguale a T_{iniziale}) [2]

1.2 La relazione di Rayleigh

Combinando le equazioni 1.4 ed 1.5, in particolare sostituendo nell'equazione dell'impulso, al valore $\rho_1 u_1^2$ la relazione $\dot{M}^2/\rho_1$, è possibile ottenere la seguente relazione [2]:

$$\frac{\dot{M}^2}{\rho_1} + p_1 = \frac{\dot{M}^2}{\rho_2} + p_2 \quad (1.11)$$

Da cui tramite semplici passaggi è possibile la relazione di Rayleigh:

$$p_2 - p_1 = -\dot{M}^2 \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) \quad (1.12)$$

Da cui è possibile osservare che, essendo $-\dot{M}^2$ una quantità sempre negativa, le variazioni di pressione ($p_2 - p_1$) avranno sempre segno opposto alle variazioni dei volumi specifici ($v_2 - v_1$). È interessante notare che sussiste una relazione lineare fra la pressione p_2 ed il volume specifico $\frac{1}{\rho_2}$. In Figura 1.6 è possibile notare tale andamento lineare per due diversi valori di portate massiche, che influenzano la pendenza di tali rette.

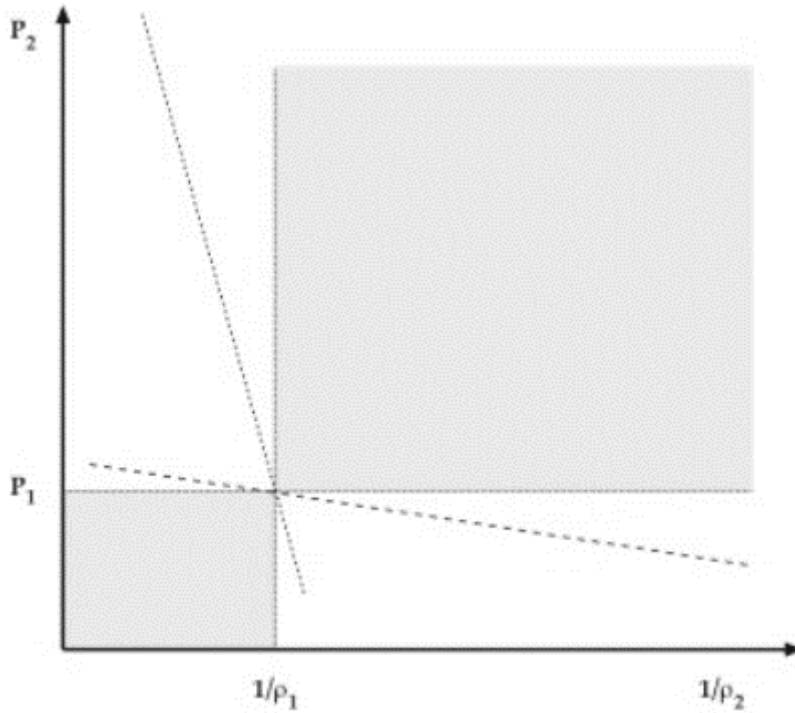


Figura 1.6: Rappresentazione di due rette di Rayleigh [2]

Si può osservare che in corrispondenza del valore sulle ascisse pari a $1/\rho_1$ la pressione è pari a p_1 , inoltre dal grafico è anche possibile notare la presenza di zone ombreggiate in cui le rette di Rayleigh non possono svilupparsi (non avrebbero significato fisico); per comprendere ciò basti ricordare il fatto che le variazioni di pressione avranno sempre segno opposto a quelle dei volumi specifici (equazione 1.8), quindi:

- Se $p_2 > p_1$ allora $1/\rho_1 > 1/\rho_2$ (riquadro non ombreggiato in alto a sinistra),
- Se $p_2 < p_1$ allora $1/\rho_1 < 1/\rho_2$ (riquadro non ombreggiato in basso a destra).

Ovviamente la pendenza dipende dalla portata massica, quanto più questa è elevata, tanto più elevata sarà la pendenza delle rette di Rayleigh.

Quindi, nel caso di detonazione, cioè un processo di combustione premiscelata in cui lo stato finale è a pressione maggiore di quello iniziale, si avrà, in seguito all'equazione (1.8), che i gas combusti avranno una densità maggiore di quelli incombusti (riquadro in alto a sinistra) e quindi, per l'equazione (1.4) la velocità u_2 sarà minore di u_1 .

Nel caso, invece, di deflagrazione, cioè un processo di combustione premiscelata in cui lo stato finale è a pressione più bassa rispetto a quello iniziale, sempre per la relazione di Rayleigh, la densità dei gas combusti

sarà più bassa, mentre la velocità sarà più alta di quella dei gas combusti. Solitamente alla detonazione sono associate portate massiche maggiori di quelle relative alla deflagrazione, quindi nella figura 1.2, la retta più inclinata può considerarsi un esempio di detonazione (avente significato fisico sono nel riquadro in alto a sinistra), mentre la retta meno inclinata può essere considerata come un esempio di deflagrazione (avente senso fisico solo nel riquadro in basso a destra) [2].

1.3 Relazione di Rankine-Hugoniot

Dall'equazione di conservazione dell'energia totale è possibile scrivere la seguente equazione [2]:

$$h_2^s - h_1^s = \frac{u_1^2}{2} - \frac{u_2^2}{2} + \Delta h^0 \quad (1.13)$$

Dove con Δh^0 si è indicata la differenza fra h_1^0 ed h_2^0 . Inoltre sfruttando l'equazione di conservazione della massa è possibile ottenere la seguente equazione:

$$h_2^s - h_1^s = -\frac{1}{2} \dot{M}^2 \left(\frac{1}{\rho_2^2} - \frac{1}{\rho_1^2} \right) + \Delta h^0 \quad (1.14)$$

Inoltre esplicitando la differenza dei due quadrati fra parentesi, si ottiene:

$$h_2^s - h_1^s = -\frac{1}{2} \dot{M}^2 \left(\frac{1}{\rho_2} - \frac{1}{\rho_1} \right) \left(\frac{1}{\rho_2} + \frac{1}{\rho_1} \right) + \Delta h^0 \quad (1.15)$$

E sostituendo l'equazione di Rayleigh si ottiene l'equazione seguente:

$$h_2^s - h_1^s = \frac{p_2 - p_1}{2} \left(\frac{1}{\rho_2} + \frac{1}{\rho_1} \right) + \Delta h^0 \quad (1.16)$$

Che prende il nome di equazione di Rankine-Hugoniot.

Nel caso in cui si adotti l'ipotesi di gas perfetti è possibile riscrivere alcuni termini della (1.12), in particolare è possibile riscrivere l'entalpia sensibile come:

$$h^s = c_p T = c_p \left(\frac{p}{\rho R} \right) = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{p}{\rho} \right) \quad (1.17)$$

Quindi la (1.12) può essere riscritta come segue:

$$\frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{p_2}{\rho_2} - \frac{p_1}{\rho_1} \right) = \frac{p_2 - p_1}{2} \left(\frac{1}{\rho_2} + \frac{1}{\rho_1} \right) + \Delta h^0 \quad (1.18)$$

Ed infine, dividendo ambo i membri della (1.14) per p_1 , di modo da esplicitare il rapporto fra p_2 e p_1 , si ottiene la seguente relazione:

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{\left(\frac{(\gamma + 1)}{\rho_1} - \frac{(\gamma - 1)}{\rho_2} + \frac{2(\gamma - 1)\Delta h^0}{p_1} \right)}{\left(\frac{(\gamma + 1)}{\rho_2} \right) - \left(\frac{(\gamma - 1)}{\rho_1} \right)} \quad (1.19)$$

Analizzando la (1.15) è possibile osservare la presenza di due asintoti. Facendo tendere il denominatore a 0, si può osservare che per $\frac{1}{\rho_2} = \frac{1}{\rho_1} \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1}$ la pressione di uscita p_2 tende ad infinito; mentre quando il reciproco della densità finale tende ad infinito, la pressione finale tende ad un valore finito pari a $p_2 = -\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} p_1$. Inoltre nel caso in cui la densità iniziale sia uguale a quella finale, la differenza fra p_2 e p_1 sarà pari a $p_2 - p_1 = (\gamma - 1)\Delta h^0$ [2].

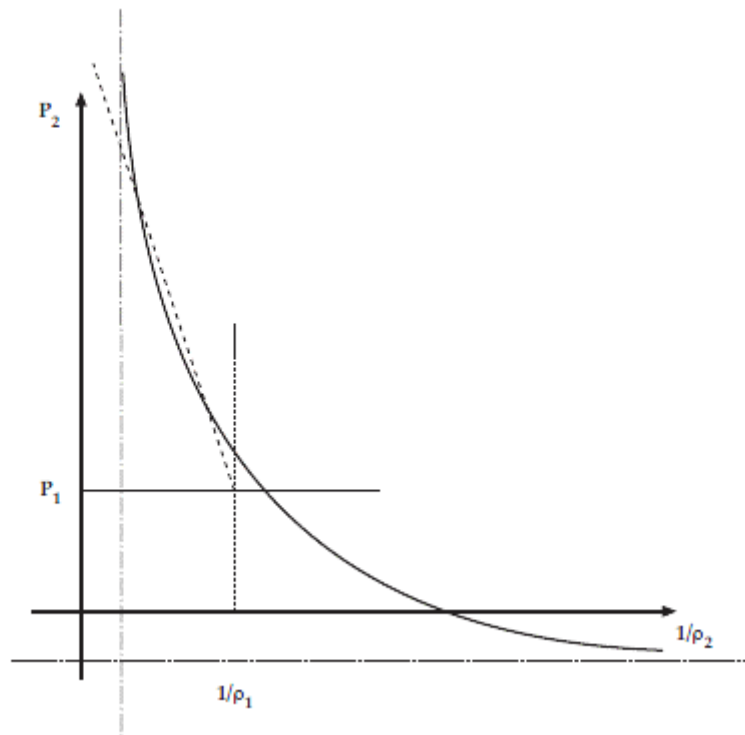


Figura 1.7: Linea continua-Curva di Rankine Hugoniot. Retta tratteggiata- Retta di Rayleigh [2]

Dalla Figura 1.7 [2] possiamo notare la presenza dei due asintoti derivanti dalla relazione di Rankine-Hugoniot (R-H), e della retta di Rayleigh la quale può intersecare la curva al massimo in due punti, questo significa che ci sono *due* possibili soluzioni delle equazioni di conservazione di massa, quantità di moto ed entalpia totale precedentemente menzionate. Le due possibili soluzioni fanno riferimento a due condizioni dette “forti” o “deboli”, nel primo caso la p_2 si discosta notevolmente dalla pressione p_1 , nel secondo caso no. Inoltre grazie all’introduzione di questa curva, è possibile ampliare la regione non ammissibile, in quanto non avranno significato fisico anche le rette di Rayleigh che non andranno ad intercettare la curva di R-H (Rankine-Hugoniot). Infatti dalla Figura 1.8 è possibile notare una zona ombreggiata addizionale, delimitata dalle tangenti alla curva di R-H. Quindi, ad esempio, nel caso di detonazione, si dovrà superare una certa portata massica data dalla retta di Rayleigh tangente alla curva di R-H [2].

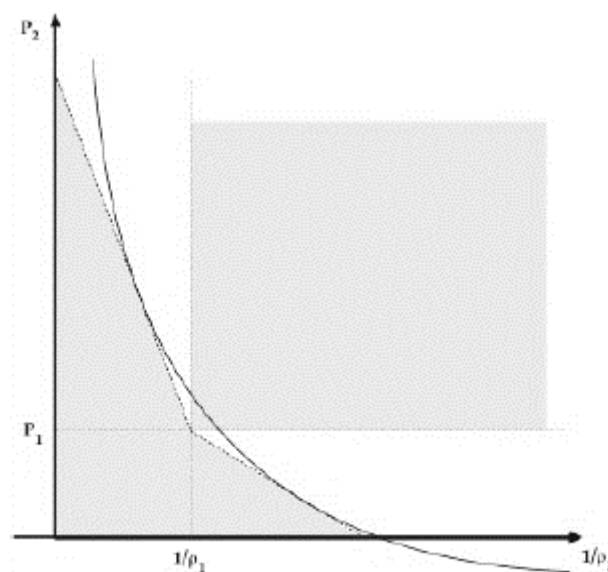


Figura 1.8: Ampliamento della zona ombreggiata, non avente significato fisico [2]

È possibile quindi definire diverse classi di deflagrazione e detonazione, in base ai punti di tangenza nella Figura 1.8 fra le rette di Rayleigh e la curva di R-H, in particolare si definisce [2]:

- **Detonazione forte:** $p_2 > p_{CJ} > p_1$ (dove con CJ indichiamo le condizioni di Chapman-Jouguet)
- **Detonazione di C-J:** $p_2 = p_{CJ} > p_1$
- **Detonazione debole:** $p_{CJ} > p_2 > p_1$
- **Deflagrazione debole:** $p_1 > p_2 > p_{lim}$
- **Deflagrazione limite:** $p_1 > p_2 = p_{lim}$
- **Deflagrazione forte:** $p_1 > p_{lim} > p_2$

Ricordando che, eccetto per le rette tangenti alla curva di R-H, sia per la detonazione che per la deflagrazione abbiamo due intersezioni, cui corrispondono la detonazione (o deflagrazione) *debole* e detonazione (o deflagrazione) *forte*.

I processi di particolare interesse applicativo sono la detonazione di C-J e la deflagrazione debole, è interessante sottolineare che molto spesso con la dicitura “fiamma premiscelata” si intende la struttura di deflagrazione debole e che con “propagazione laminare di fiamma” si intende la velocità di propagazione dell’onda deflagrante.

1.4 Velocità di propagazione di fiamma laminare LFS

Durante la combustione deflagrante, si ricorda, che la pressione rimane pressoché uniforme in tutta la regione interessata, inoltre è importante ricordare che durante tale combustione si ha una diminuzione di densità da parte dei prodotti di combustione, la quale provoca un incremento della velocità di propagazione del fronte di fiamma (Figura 1.1). La velocità di propagazione del fronte di fiamma laminare risulta essere una delle proprietà più importanti nello studio della combustione, la sua identificazione ricopre un ruolo cruciale nel calcolo della velocità turbolenta [2]. Il perché tale grandezza risulti essere particolarmente importante è spiegato dal fatto che molti fenomeni dipendono da essa, come la struttura e la velocità di fiamma turbolenta, instabilità del fronte di fiamma, stiramenti del fronte, ecc... Essa ricopre un ruolo chiave in molte applicazioni tecniche che coinvolgano la combustione come motori a combustione interna, turbine a gas, bruciatori, predizione di esplosioni.

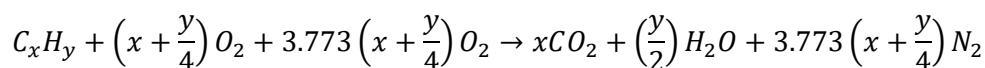
Nel caso dei motori a combustione interna il valore della velocità laminare di propagazione del fronte (o Laminar Flame Speed LFS), influenza in maniera diretta:

- il valore dell’anticipo di accensione (che a sua volta ha ripercussioni sulle prestazioni e sulle emissioni del motore);
- la dispersione ciclica (fenomeno per cui un ciclo, seppur riferito allo stesso cilindro, tende ad essere diverso da quello precedente);
- spessore del *wall quench layers* (spessore entro cui la combustione non prosegue a causa delle basse temperature cui si trovano le pareti della camera di combustione), tale fenomeno è cruciale nella produzione di HC (idrocarburi incombusti).

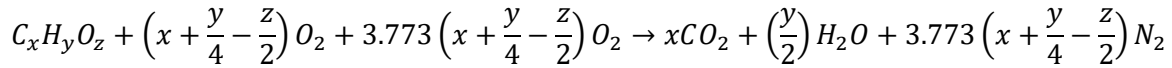
La velocità laminare è una caratteristica intrinseca di un combustibile ed i principali parametri che la influenzano sono la temperatura, la pressione, il rapporto di equivalenza (equivalent ratio ϕ), percentuale di gas combustibili presenti nella miscela.

1.4.1 Dipendenza da temperatura e pressione di miscela

Il parametro che più influenza la Laminar Flame Speed è la temperatura, questo perché alla base della propagazione del fronte di fiamma ci sono delle reazioni chimiche, per cui quanto più queste reazioni vengono completate velocemente tanto più la LFS aumenta. Per comprendere meglio questo aspetto bisogna ricordare alcuni concetti di cinetica chimica, fenomeno fisico fondamentale per eventi fisici di così breve durata. Le reazioni di combustione, infatti, non avvengono in un unico step secondo la reazione ideale seguente:



Nel caso in cui si utilizzi un generico combustibile ossigenato $C_xH_yO_z$:



La combustione avviene in realtà mediante una serie di reazioni intermedie, che portano prima ad una deidrogenazione della molecola di combustibile, ed in seguito all'ossidazione dello scheletro carbonioso. La modellazione della sequenza di queste reazioni *a catena ramificata* risulta essere particolarmente complessa date le numerose combinazioni di reazioni possibili, risultando fattibile soltanto per molecole di combustibile abbastanza semplici, come metano (Figura 1.9) ed idrogeno.

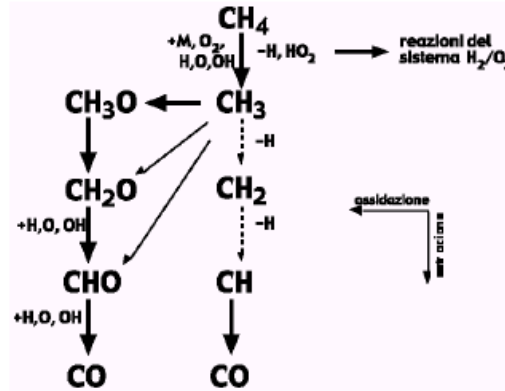


Figura 1.9: Esempio di prereazioni che coinvolgono la molecola di metano [4]

La velocità con cui procedono le reazioni intermedie (o prereazioni) è possibile valutarla con la relazione (1.21), infatti data una generica reazione di combustione:

$$\sum_{i=1}^n \nu_{R_i} M_{R_i} = \sum_{i=1}^m \nu_{P_i} M_{P_i} \quad (1.20)$$

Dove con ν_{R_i} ed ν_{P_i} si indicano i coefficienti stechiometrici rispettivamente di reagenti (M_{R_i}) e prodotti (M_{P_i}), della generica reazione in considerazione. La velocità con cui vengono consumati i reagenti (o con cui procede la reazione da sinistra verso destra) è data dalla seguente relazione:

$$R^+ = k^+ \prod_{i=1}^n [M_{R_i}]^{\nu_{R_i}} \quad (1.21)$$

Dove la costante k^+ segue la legge di Arrhenius:

$$k^+ = a \cdot T^b e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (1.22)$$

Dove a , b ed E_a (cioè l'energia di attivazione della generica reazione), dipendono dal tipo di reazione, quindi la (1.21) afferma che la velocità con cui viene generato un prodotto di una generica reazione, dipende in maniera *esponenziale* dalla temperatura [6]. In Figura 1.10 è presentata una rappresentazione grafica dell'energia di attivazione che bisogna superare affinché la reazione avvenga, e fornisce anche un'idea di quanto siano sfavorite le reazioni inverse (cioè da destra verso sinistra), data la maggiore soglia di energia di attivazione da superare (indicata con E_b).

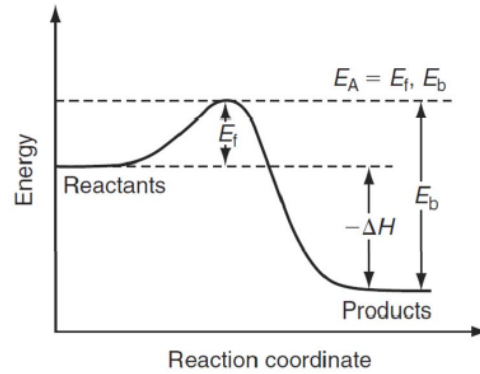


Figura 1.10: Rappresentazione grafica dell'energia di attivazione di una generica reazione

Nel caso di combustibili più complessi, come benzina o gasolio, è impensabile un approccio di questo tipo (cioè modellare la chimica delle reazioni di combustione) in quanto sono costituiti da diverse tipologie di idrocarburi; pertanto si preferisce studiare dei surrogati aventi le stesse caratteristiche dei combustibili di partenza.

Quindi alla luce dell'equazione (1.22), anche la velocità laminare di propagazione del fronte di fiamma aumenterà esponenzialmente con la temperatura, perché aumenterà esponenzialmente con essa la velocità con cui verranno completate le prereazioni. È importante sottolineare, alla luce dell'equazione (1.21) che anche le concentrazioni di reagenti e prodotti giocano un ruolo fondamentale nell'accelerare o rallentare le reazioni chimiche; si potrebbe aggiungere che anche la forma dei reagenti ricopre un ruolo fondamentale per la velocità osservata (la lana d'acciaio si ossida molto più velocemente di un chiodo di ferro in ambiente ossidante).

Per quanto riguarda la dipendenza dalla pressione, la si può dedurre dall'equazione seguente [6]:

$$S_L = S_{L0} \left(\frac{T_x}{T_0} \right)^2 \left(\frac{p_x}{p_0} \right)^{-0.25} \cdot (1 - c \cdot x_{burn}^{0.7}) \quad (1.23)$$

La correlazione (1.23) permette di calcolare la LFS in condizioni diverse da quelle ambiente, indicate con il pedice 0, mentre con x_{burn} si indica la frazione di gas combusti presenti nella miscela. Si può notare che l'effetto dell'aumento di pressione è quello di diminuire il valore della LFS, in particolare le variazioni di pressione nell'intorno della pressione ambiente hanno un grosso impatto sulla velocità laminare, per alti valori di pressione si può addirittura trascurare la dipendenza dalla pressione. Il motivo per cui la pressione ha un impatto negativo sulla LFS risiede nello scambio termico, infatti all'aumentare della pressione aumenta anche la densità dei gas, di conseguenza, a parità di volume considerato, aumenterà massa e quindi anche il calore che dovrà essere ceduto per la propagazione del fronte di fiamma.

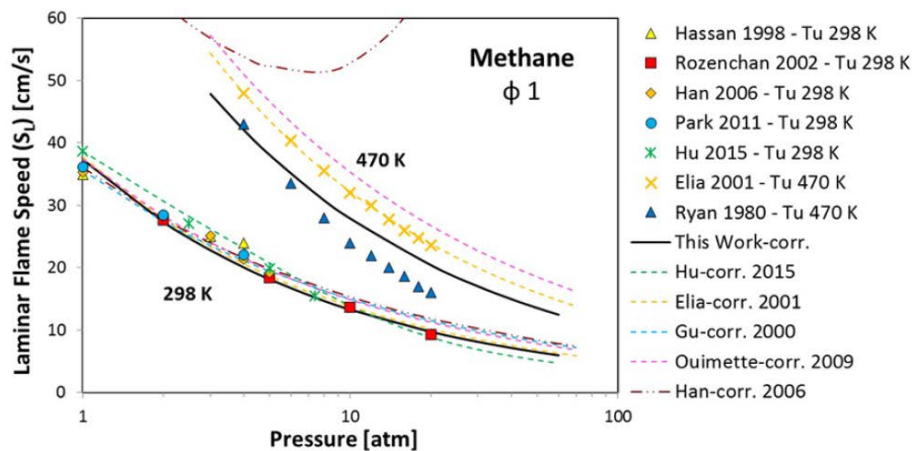


Figura 1.11: Andamenti sperimentali della LFS al variare della pressione, per una miscela stechiometrica di metano a 298 K e 470 K [7]

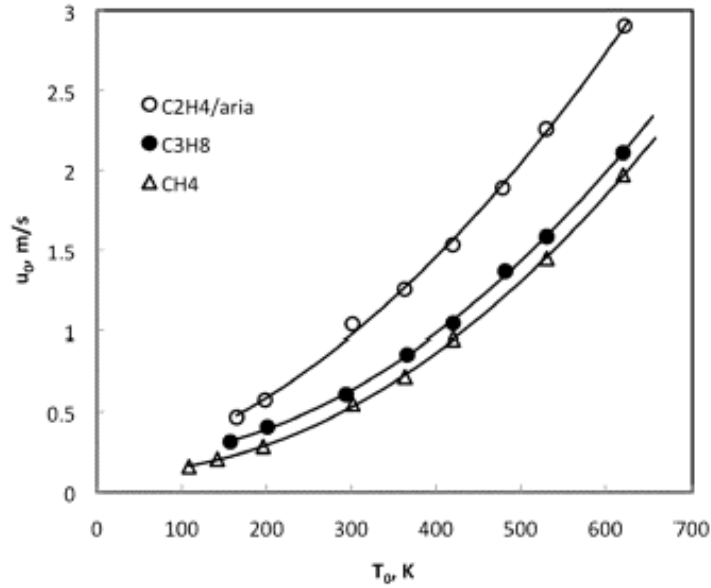
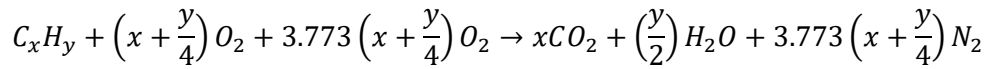


Figura 1.12: Dipendenza della temperatura di miscela sulla velocità laminare per diverse tipologie di combustibile [2]

1.4.2 Dipendenza dalla dosatura della miscela

Con dosatura stechiometrica si intende il giusto rapporto fra massa di aria e di combustibile tale da completare perfettamente la reazione chimica di ossidazione di combustibile, senza che ci sia eccesso di comburente o combustibile. Esso può essere determinato considerando la reazione di ossidazione ideale di un generico combustibile non ossigenato:



Che porta ad avere un rapporto aria-combustibile stechiometrico, pari a:

$$\left(\frac{A}{F}\right)_{ST} = \frac{\left(1 + 0.25 \cdot \frac{y}{x}\right) (2\mu_O + 2 \cdot 3.773\mu_N)}{\mu_C + \frac{y}{x}\mu_H} \quad (1.24)$$

Quindi il rapporto $(A/F)_{ST}$ dipende unicamente dal rapporto fra atomi di idrogeno ed atomi di ossigeno (y/x), nel caso di benzina o gasolio, tale rapporto è pari a circa 1.85, portando ad una dosatura stechiometrica pari a 14.6; nel caso del metano invece $y/x = 4$ e quindi $(A/F)_{CH_4} = 17.23$.

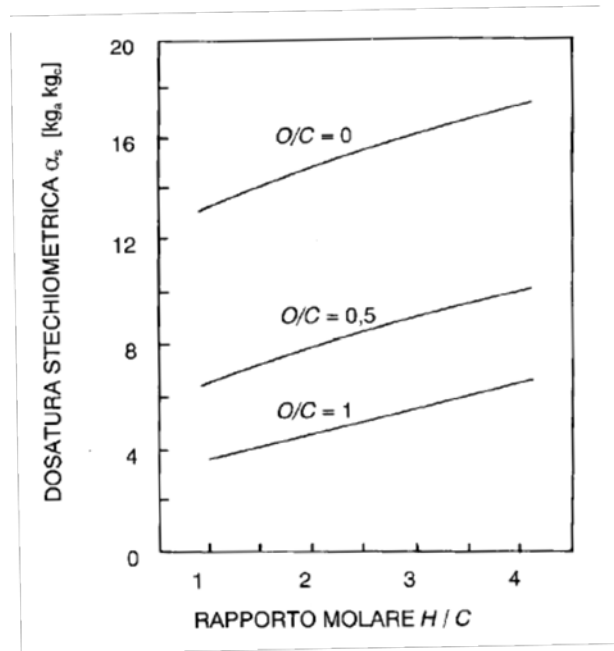


Figura 1.13: Rappresentazione grafica dell'equazione (1.18), per diverse tipologie di combustibili ossigenati [4]

In Figura 1.13 è rappresentato l'andamento della dosatura stechiometrica per diversi valori di rapporto molare idrogeno-carbonio, per diverse tipologie di combustibili ossigenati. È importante tanto più ossigeno contiene la molecola di combustibile, tanto più bassa è la dosatura stechiometrica, questo perché l'ossigeno necessario per la combustione è già in parte contenuto nella molecola stessa.

Molto spesso però si utilizzano dosature differenti da quelle stechiometriche, da qui l'esigenza di introdurre un nuovo parametro, cioè la dosatura relativa (o *equivalent ratio* ϕ):

$$\phi = \begin{cases} \phi > 1 \rightarrow \text{dosatura ricca (eccesso di combustibile)} \\ \phi = 1 \rightarrow \text{dosatura stechiometrica} \\ \phi < 1 \rightarrow \text{dosatura povera (eccesso di aria)} \end{cases} \quad (1.25)$$

Per quanto riguarda la dipendenza della LFS da questo parametro, si avrà la massima velocità di propagazione nell'intorno dello stechiometrico (in realtà nel campo del leggermente ricco), per poi crollare per valori lontani dallo stechiometrico, come riportato in Figura 1.14. Il motivo per cui il picco della velocità di propagazione del fronte di fiamma si trovi nel leggermente ricco è da ricercarsi nella temperatura adiabatica di fiamma, infatti questa avrà un picco nel leggermente ricco, provocando un'accelerazione delle reazioni (dipendenza esponenziale dalla temperatura) e quindi della velocità di propagazione del fronte. La temperatura adiabatica di fiamma ha un picco nel leggermente ricco perché in questa zona si ha più produzione di CO che di CO₂, provocando una diminuzione del calore specifico dei prodotti (infatti i gas triatomici assorbono più energia di quelli biatomici), di conseguenza verrà assorbita meno energia dai prodotti che andrà quindi ad aumentare la temperatura adiabatica di fiamma. Ovviamente tale ragionamento è ristretto soltanto a questa zona di rapporto di equivalenza, in quanto per valori lontani dallo stechiometrico si avrà o un eccesso di aria o di combustibile, e poiché tutto ciò che non brucia assorbe energia, si avrà una diminuzione della temperatura adiabatica di fiamma e quindi di velocità di propagazione del fronte.

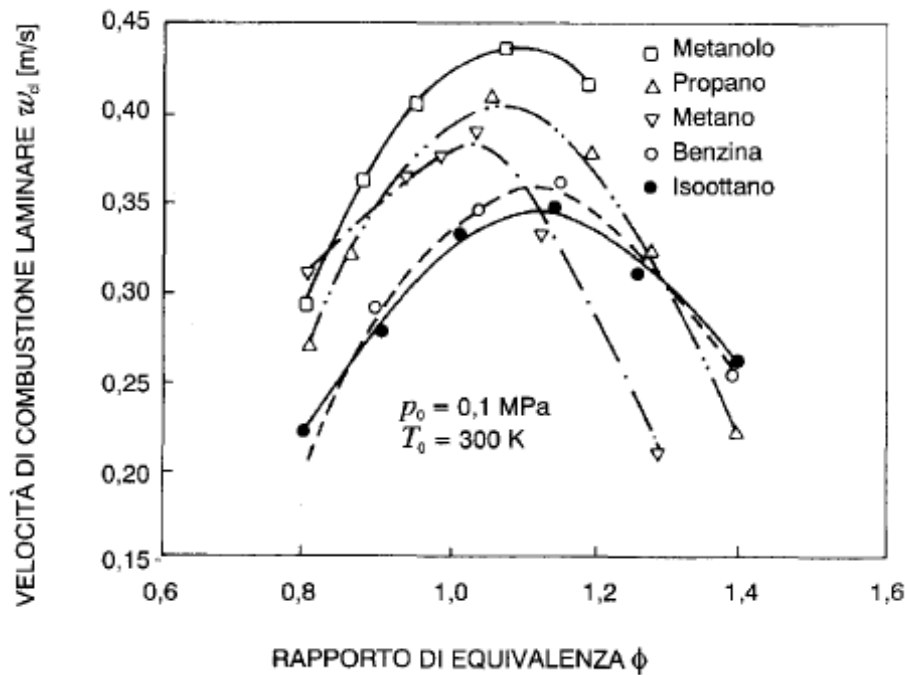


Figura 1.14: Andamento della LFS al variare del rapporto di equivalenza [4]

Come si può osservare dalla Figura 1.14, le curve di LFS vengono rappresentate soltanto in una porzione di rapporto di equivalenza, tale porzione è delimitata dai *limiti di infiammabilità*. Si definiscono, infatti, due limiti di infiammabilità:

- **Limite di infiammabilità superiore:** massima percentuale in volume di combustibile in aria per il quale si ha propagazione del fronte di fiamma, infatti quando si ha un eccesso di combustibile, la reazione anziché essere endotermica diventa esotermica provocando un arresto del fronte di fiamma;
- **Limite di infiammabilità inferiore:** minima percentuale in volume di combustibile in aria per il quale si ha propagazione di fiamma.

In Tabella 1.1 sono riportati alcuni valori per i principali combustibili che ricorrono nelle applicazioni pratiche [2].

Combustibile	Limite inferiore (% in volume di combustibile)	Limite superiore (% in volume di combustibile)
Idrogeno	4	75
Metano	5	15
Etano	3	12
Propano	2	9.5
Benzene	1.5	7
Gas Naturale	5	15

Tabella 1.1: Limiti di infiammabilità per alcune tipologie di combustibili [2]

Si può notare il notevole range di infiammabilità dell'idrogeno che riesce a bruciare in condizioni anche molto lontane da quelle stechiometriche, questo, insieme all'elevatissima velocità di propagazione del fronte di fiamma, rappresenta uno dei punti di forza di questo combustibile. Motivo per cui si stanno studiando dei combustibili alternativi come metano addizionato con idrogeno per poter unire i punti di forza di due differenti combustibili.

1.4.3 Dipendenza dalla frazione di gas combustibili nella miscela

Molto spesso in ambito motoristico, si ricorre al riutilizzo dei gas combusti, reintroducendoli in camera di combustione di modo da contenere le emissioni o per operare un'operazione di dethrottling ai carichi parziali, nel caso di motori ad accensione comandata. Tale tecnica prende il nome di EGR (Exhaust Gas Recirculation). L'impatto di questa frazione di gas combusti sulla LFS è negativo, provocando un rallentamento di essa per

diverse motivazioni, in primis andando a ridurre le temperature in camera, verrà anche ridotta la velocità delle reazioni e quindi la velocità di propagazione, ma andrà anche ad intaccare le concentrazioni dei reagenti, rendendo meno probabile l'urto fra i vari reagenti. Anche in questo caso tale dipendenza può essere estratta dalla relazione (1.17) che contiene il termine x_{burn} che indica la frazione di gas combustibili presenti in camera.

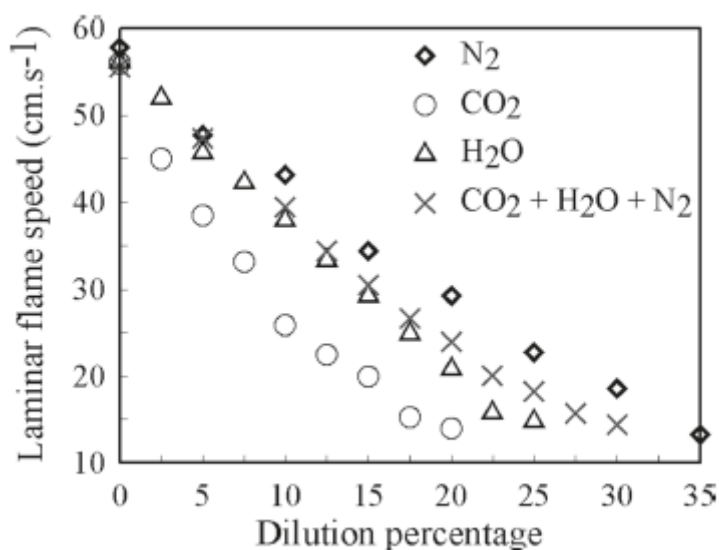


Figura 1.15: Andamento della LFS per diversi valori di diluizione per 4 differenti diluenti. La miscela in considerazione è una miscela stechiometrica di metano ed aria al $T=393\text{ K}$ e $p=0.1\text{ Mpa}$ [8].

1.5 Struttura del fronte di fiamma laminare

La struttura del fronte di fiamma laminare si può suddividere in 3 zone [2]:

- Nella prima parte la temperatura sale con andamento esponenziale, mentre l'entalpia di formazione rimane costante, questo implica che la combustione vera e propria non è ancora iniziata. Però comunque avvengono le prime reazioni che portano alla deidrogenazione della molecola di combustibile ad opera di radicali che provengono dalla zona di reazione per diffusione. Pertanto in questa fase il fenomeno controllante risulta essere quello della diffusione dei radicali.
- Nella seconda zona la crescita della temperatura e dell'entalpia di formazione diviene lineare, tale zona è denominata spessore di fiamma. In tale zona il trasporto per diffusione può essere considerato trascurabile rispetto a quello per convezione. Al termine di questa zona, praticamente tutto il combustibile sarà stato ossidato.
- Nella terza regione, sia l'entalpia di formazione che la temperatura crescono molto lentamente. Tale zona è denominata zona di post-combustione

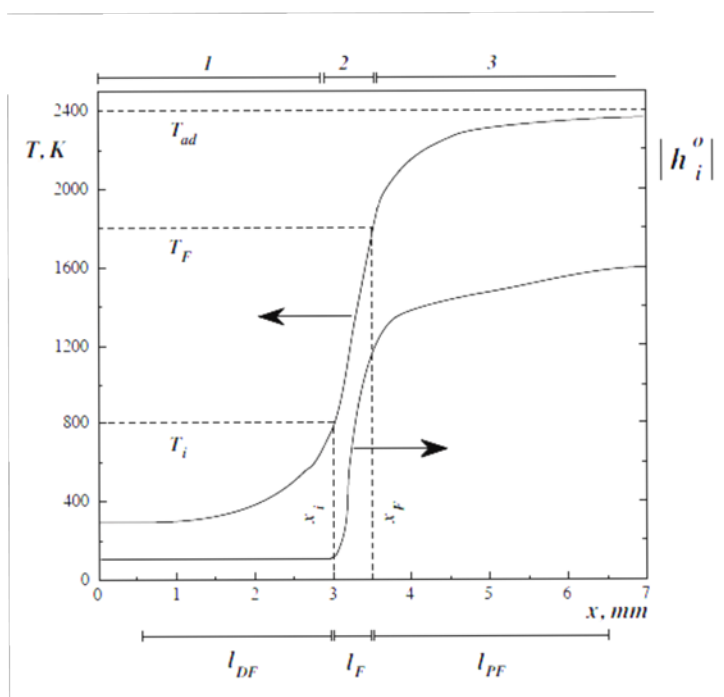


Figura 1.16: Andamento spaziale della temperatura in una fiamma premiscelata unidimensionale [2]

Dalla Figura 1.16 sono indicati le 3 zone precedentemente citate, in maniera più sintetica si potrebbe dire che la prima zona va da T_0 (valore di temperatura iniziale) a T_i (valore della temperatura di ignizione), nella seconda zona si ha un aumento lineare della temperatura di fiamma, e nella terza essa tende a crescere più lentamente, fino a tendere alla temperatura adiabatica di fiamma. Per quanto riguarda la temperatura di ignizione, essa rappresenta la temperatura cui ha inizio la combustione di una miscelata stechiometrica che si trova a pressione ambiente (ovviamente se la pressione varia anche la temperatura di ignizione varierà). In Tabella 1.2 sono riportate per diversi combustibili, le relative temperature di ignizione a pressione ambiente.

Combustibile	Temperatura di ignizione in °C
Idrogeno	572
Metano	632
Etano	472
Propano	493
Cetano	235
Benzina	280-420

Tabella 1.2: Temperatura di ignizione per diversi combustibili in condizioni stechiometriche ed a pressione ambiente [2]

Nella Figura 1.17 si può notare anche l'andamento delle varie specie chimiche durante l'attraversamento del fronte di fiamma. È interessante notare che la velocità laminare è definita con un verso discorde a quello di propagazione del fronte di fiamma (quindi come se il fronte fosse fermo e la miscela lo attraversasse ad una velocità pari alla velocità laminare); questo perché essa è definita come la velocità con cui vengono consumati i reagenti della miscela reattiva.

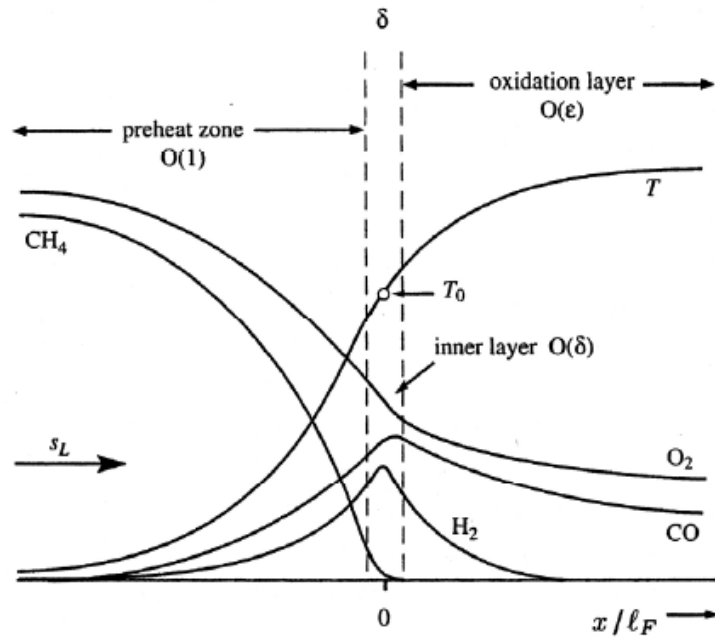


Figura 1.17: Andamento delle concentrazioni di diverse specie chimiche coinvolte durante la combustione del metano [5]

1.6 Effetti della dilatazione dei gas combusti

I reagenti, attraversando il fronte di fiamma, si trasformeranno in prodotti di combustione, aventi una temperatura maggiore, densità minore ma pressione pressoché invariata. A causa di questa diminuzione di densità, il fronte di fiamma verrà sospinto dalla dilatazione dei gas combusti, tale aspetto risulta essere di notevole importanza nei motori ad accensione comandata. Per comprendere meglio tale fenomeno è possibile osservare la Figura 1.18, dove sono rappresentati 3 diversi step di una combustione in maniera schematica. È interessante notare che la dilatazione dello strato interessato dalla combustione, comporta non solo una compressione dei gas incombusti a valle del fronte, ma anche dei gas combusti a monte del fronte di fiamma. Ciò comporterà la formazione di gradienti di temperatura all'interno della zona di gas combusti, per cui il primo strato di miscela che brucerà sarà quello che si manterrà a temperatura maggiore durante tutta la propagazione del fronte, perché subirà un'ulteriore compressione che comporterà un innalzamento delle temperature.

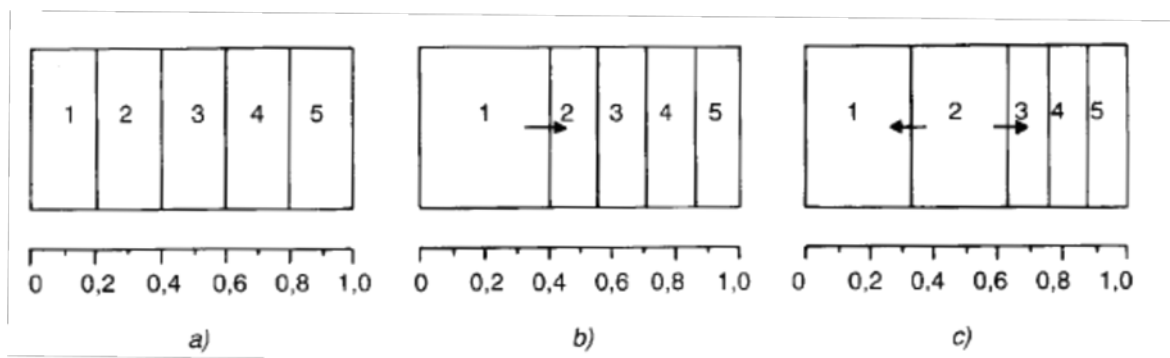


Figura 1.18: Rappresentazione grafica di 3 diversi step di propagazione del fronte di fiamma [4]

Tuttavia, il fenomeno più critico riguarda la compressione dei gas incombusti, per aver un ordine di grandezza si può considerare la relazione 1.24 (ottenibile tramite semplici passaggi dalle relazioni 1.22 ed 1.23):

$$m = m_m + m_b \quad (1.26)$$

$$V = V_m + V_b \quad (1.27)$$

$$x_b = \left[1 + \frac{\rho_m}{\rho_b} \left(\frac{1}{y_b} - 1 \right) \right]^{-1} \quad (1.28)$$

Dove con il pedice b si indica la massa bruciata e con m la miscela che deve ancora bruciare, e con x e y rispettivamente la frazione massica e volumica di massa bruciata. Andando a plottare la funzione (1.24) in Figura 1.19:

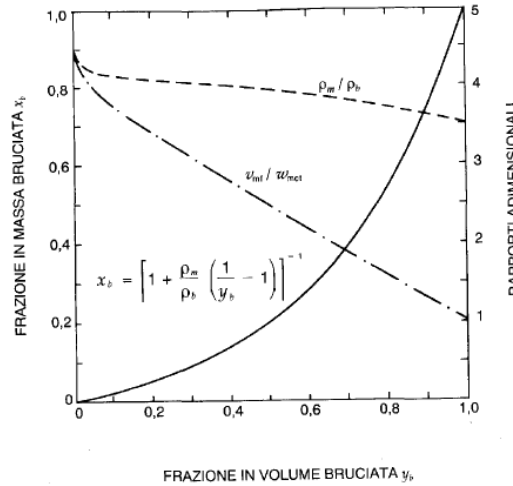


Figura 1.19: Andamento della frazione di massa bruciata in funzione della frazione volumica bruciata [4]

Si può notare che quando è stato spazzato l'80% del volume della camera di combustione, soltanto il 50% in massa della miscela è stato coinvolto dal processo di combustione, quindi il rimanente 50% in massa sarà compresso nel rimanente 20% in volume della camera.

Tale compressione provocherà un innalzamento delle temperature, che a loro volta andrà a velocizzare le reazioni intermedie. Se tale compressione persiste per un intervallo di tempo prolungato, tale da portare al completamento delle prereazioni prima dell'arrivo del fronte di fiamma, si verifica il fenomeno della detonazione o *knock* che porta a bruciare tutta la miscela in maniera incontrollata ed istantanea. Un parametro su cui si potrebbe intervenire è quello della riduzione dell'anticipo di accensione, di modo da far stazionare per meno tempo possibile l'*endgas* ad elevate temperature e ridurre il rischio di detonazione, ma allo stesso tempo anche il rendimento del motore. Una regola pratica è quella di piazzare il baricentro della combustione 8°-10° dopo il PMS.

1.7 Velocità turbolenta di propagazione del fronte di fiamma

Osservando i dati della LFS in Figura 1.14 si può osservare che tali velocità non sono compatibili con il funzionamento di un motore a combustione interna. Infatti prendendo in considerazione una camera di combustione avente un alesaggio D pari a 100 mm, il che implica che il fronte di fiamma deve percorrere un tratto pari a $D/2$ per bruciare tutta la miscela in camera (supponendo centrale la posizione della candela in camera). Supponendo ulteriormente che il motore giri a 3000 giri/min, e supponendo una durata angolare del fenomeno di combustione paria a 36°, allora tale intervallo angolare verrà spazzato in 0.002 s. In questo intervallo di tempo, per completare la combustione, la velocità del fronte dovrebbe essere pari a $(0.05 [m]) / (0.002 [s]) = 25 [m/s]$.

Confrontando tale velocità con quelle in Figura 1.14 si può notare che le velocità rappresentate sono un ordine di grandezza più basse. In realtà bisogna considerare che al momento dello scocco della scintilla i gas si trovano ad una temperatura diversa da quella ambiente, cioè pari a circa 700 K (temperatura di fine compressione). Quindi, tenendo conto di condizioni diverse rispetto a quelle ambiente sia di pressione che di temperatura, ed inserendo tali valori nella correlazione (1.19) si arriva ad un valore di LFS circa doppio, quindi non ancora sufficiente per spiegare il funzionamento del motore a combustione interna [6].

In realtà bisogna tenere conto anche del corrugamento del fronte di fiamma, il quale ha un effetto moltiplicativo sulla velocità laminare di propagazione del fronte, infatti si può definire una velocità turbolenta pari a:

$$S_T = \frac{A_T}{A_L} S_L \quad (1.29)$$

In questo modo si riescono a raggiungere valori di velocità dell'ordine dei metri al secondo, e quindi compatibili con il funzionamento del motore. È importante, inoltre, sottolineare altri due aspetti, il primo è che a livello locale la velocità di propagazione rimane comunque laminare, quindi la definizione di una velocità turbolenta è più per questioni pratiche, l'unica cosa che cambia è l'area del fronte che coinvolge una frazione maggiore di miscela. Il secondo aspetto riguarda l'effetto della turbolenza sul fronte, in particolare tale corrugamento, e quindi l'area, aumenta in maniera lineare con l'intensità di turbolenza la quale a sua volta scala in maniera lineare con il numero di giri del motore, quindi si verifica un fenomeno di auto-adattamento della combustione nei motori ad accensione comandata (in realtà non tutta la fase di combustione scala con il numero di giri, soltanto la *rapid burning phase*). Tale fenomeno permette, infatti, il raggiungimento di velocità, nel caso di motori da competizione ad accensione comandata, anche dei 20000 rpm.

1.8 Perché il metano?

In questo lavoro di tesi si focalizzerà l'attenzione su un combustibile in particolare, cioè il metano (CH_4). Tale combustibile, insieme all'idrogeno, è alla base di un progetto europeo (GASON Gas Only internal combustion engine), finalizzato allo sviluppo di motori a combustione interna funzionanti con metano, addizionato con percentuali di idrogeno che vanno dal 5 al 20%. Il metano risulta essere una valida alternativa alle comuni benzine per la riduzione delle emissioni di CO_2 , questo perché semplicemente si parte da una molecola di combustibile avente un solo atomo di carbonio, contro circa una decina di quelli contenuti nelle benzine attuali. Inoltre il metano presenta altri aspetti positivi, come una elevata resistenza alla detonazione, questo perché esso risulta essere particolarmente compatto dal punto di vista molecolare, a differenza della molecola di normal-eptano che può dar vita a fenomeni di interossidazione che portano ad un'accelerazione delle reazioni chimiche. Per questo motivo esso presenta un numero di ottano pari circa a 120 (solitamente i valori sono compresi fra 0 e 100), indice di una buona resistenza alla detonazione; questo permette quindi di poter aumentare, per esempio, l'anticipo di accensione, quindi spostare il baricentro di combustione nell'intorno del PMS e in definitiva aumentare il rendimento del motore. In Figura 1.20 è possibile notare che un valore plausibile di anticipo di accensione è di circa 30° di modo da poter sfruttare il più possibile la corsa di espansione e raccogliere più lavoro possibile e quindi aumentare il rendimento.

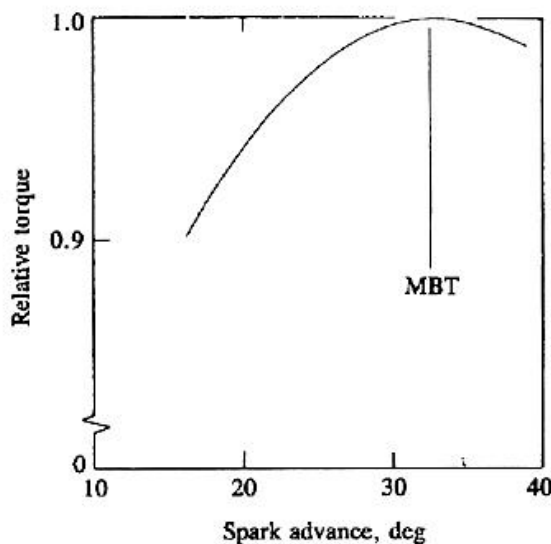


Figura 1.20: Andamento della coppia relativa al variare dell'anticipo di accensione [6]

Con MBT in Figura 1.20, si indica la Maximum Brake Torque, cioè la massima coppia che è possibile raccogliere al freno. Un altro importante aspetto positivo riguarda le emissioni di idrocarburi incombusti, che risulterebbero particolarmente ridotte, in quanto un importante contributo solitamente deriva dagli HC (idrocarburi incombusti) assorbiti e poi rilasciati dallo strato di olio lubrificante depositato sulle pareti della camera di combustione. Nel caso del metano, avendo quest'ultimo una bassa solubilità nell'olio lubrificante, tale fenomeno non avverrebbe, andando ad eliminare una delle cause principali di emissioni di HC.

Però il metano presenta anche alcuni inconvenienti, come il fatto di limitare il riempimento in camera di combustione, infatti trattandosi di un combustibile allo stato gassoso, per forza di cose andrà ad occupare un volume che altrimenti sarebbe stato occupato da aria; riducendo il riempimento si andranno a ridurre le

prestazioni del motore. Inoltre esso non presenta valori particolarmente elevati di LFS, anche per questo motivo si è deciso di aggiungere idrogeno, di modo da risolvere questo problema, permettendo una durata della fase di combustione più ridotta, e quindi un aumento del rendimento del motore. Il diretto inconveniente dell'aggiunta di idrogeno è il raggiungimento di elevate temperature in camera di fine combustione, e quindi un aumento delle emissioni di NOx (la cui produzione dipende principalmente da un meccanismo termico che è fortemente influenzato dalle temperature raggiunte in camera). Inoltre un altro inconveniente potrebbe ancora essere causato dal fatto di trovarsi allo stato gassoso, infatti nei motori tradizionali ad accensione comandata, utilizzando un combustibile ricco si riesce a diminuire le temperature in camera grazie al calore sottratto per la vaporizzazione del combustibile. Nel caso del metano, non si potrebbe contare su questo effetto per contenere le temperature in camera.

1.8.1 Miscele di metano ed idrogeno

Come detto nel paragrafo precedente, una promettente alternativa ai combustibili convenzionali è rappresentata da miscele di idrogeno e metano. Infatti in questo modo si riesce ad unire i pregi del metano (primo fra tutti la resistenza alla detonazione), con i pregi dell'idrogeno (primo fra tutti l'elevata laminar flame speed). Infatti fra i difetti del metano troviamo anche una bassa velocità di propagazione del fronte per miscele anche di poco lontane dallo stechiometrico. Si potrebbe pensare di intensificare la turbolenza in camera di modo da compensare i bassi valori di velocità di propagazione del fronte, ad esempio utilizzando condotti tuffanti per imprimere un moto alla carica entrante, in tal modo però verrà intaccato il coefficiente di riempimento, in quanto non si andrebbe ad utilizzare tutta la sezione trasversale del condotto. La soluzione allora può essere quella di utilizzare come additivo l'idrogeno, che permette anche di ridurre la variabilità ciclica del motore, il funzionamento ai carichi parziali ed anche di ridurre il *misfire* (cioè mancata o incompleta combustione). Nella tabella seguente è possibile apprezzare le principali differenze fra i due combustibili in esame, prestando particolare attenzione alla laminar flame speed ed al limite di infiammabilità [1].

	Metano	Idrogeno
Peso molecolare [g/mol]	16.04	2.02
C/H ratio [%]	0.25	0
Densità [kg/m ³]	0.67	0.08
Potere calorifico inferiore [MJ/kg]	50	120
Range di infiammabilità [% vol]	5.3/14	4/75
Massima LFS [m/s]	0.35	4
Equivalent Ratio [kg/kg]	17.24	34.20
Quenching distance [mm]	1.9	0.6
Densità energetica [MJ/l]	33.5	9.6

Tabella 1.3: Confronto fra metano ed idrogeno [1]

Un parametro particolarmente interessante risulta essere la densità energetica, nettamente a favore del metano. Ciò significa che, a causa della bassa densità dell'idrogeno, c'è bisogno di stoccare a bordo del veicolo una grande quantità di combustibile. Inoltre nel caso dell'idrogeno, notiamo un elevatissimo valore di rapporto stechiometrico, ciò implica l'introduzione in camera di combustione di grandi quantitativi di aria per fare in modo che il motore funzioni con rapporto stechiometrico. Quindi quando si andrà a creare la miscela di metano ed idrogeno, bisogna realizzare una scelta di compromesso fra il miglioramento della combustione dovuto all'aggiunta di idrogeno e la contemporanea diminuzione della densità energetica.

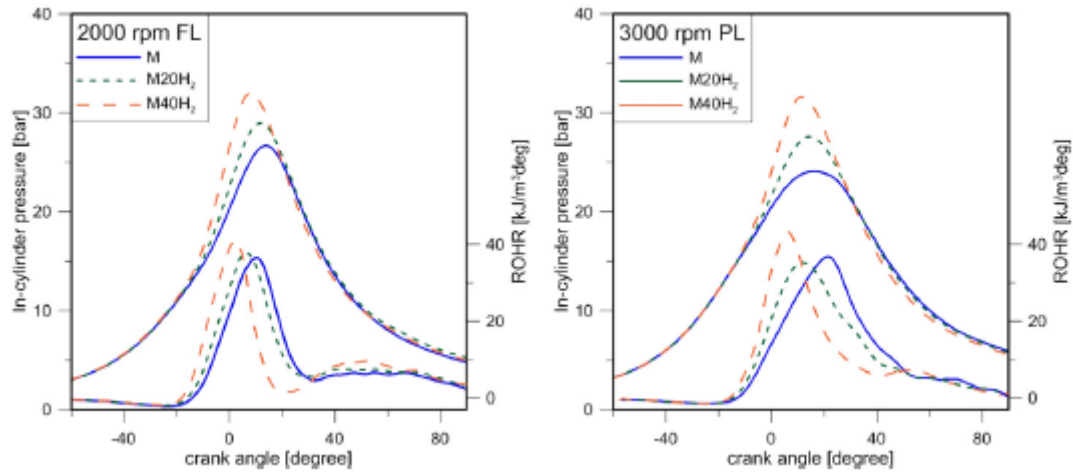


Figura 1.21: Andamento delle pressioni in camera per diverse miscele di metano ed idrogeno. A sinistra 2000 rpm a pieno carico, a destra 3000 rpm a carico parziale [1]

Dalla Figura 1.21 si può notare come l'aggiunta di idrogeno permetta un completamento della fase di combustione in intervalli di tempo sempre più ridotti, però con conseguente raggiungimento di temperature sempre maggiori (la combustione tende a quella isocora ideale prevista dal ciclo Otto), con conseguente aumento di emissioni di NOx.

2 Metodi di misurazione della LFS

2.1 LFS

Come accennato nel capitolo precedente, la laminar flame speed ricopre un ruolo fondamentale in molti aspetti che riguardano il motore a combustione interna. Con velocità laminare intendiamo la velocità *relativa e normale* al fronte di fiamma, con cui i gas incombusti si muovono entro il fronte e vengono trasformati in prodotti, sotto ipotesi di flusso laminare. Quindi una fiamma laminare sarà:

- Stazionaria (la derivata temporale delle principali grandezze fisiche che interessano in fenomeno risultano essere nulle, in zone sufficientemente lontane dal fronte di fiamma);
- Quasi-adiabatica;
- Monodimensionale;
- Piana;
- Priva di dilatazioni (stretch-free).

Quindi, nel caso di fiamme dilatate (ad esempio fiamme sferiche), sarà fondamentale ricondursi ad una situazione di stretch-free, riconducendosi ad una fiamma piana, come in Figura 2.1.



Figura 2.1: Caso pratico cui ci si vuole ricondurre per la determinazione della velocità laminare [2]

Nella pratica però, risulta essere particolarmente complesso soddisfare tutte le ipotesi citate precedentemente, per cui si tende a rilassare alcune di esse ed a definire una velocità detta *flame speed*, leggermente differente dalla LFS.

Data la notevole importanza di questo parametro, molti sono i metodi sviluppati per la sua determinazione al variare dei principali parametri che la influenzano: pressione, temperatura, rapporto di equivalenza, percentuale di gas combustibili. L'importanza dell'attendibilità delle misurazioni della velocità laminare impatta direttamente anche i meccanismi chimici che simulano le reazioni di ossidazione del generico combustibile, in quanto questi meccanismi vengono validati con un confronto con i dati sperimentali presenti in letteratura. Fondamentale, quindi, risulta essere una convergenza di diverse misurazioni verso un medesimo risultato, di modo da ridurre la dispersione dei dati iniziali, e rendere i meccanismi chimici sempre più attendibili ed in definitiva ricorrere il meno possibile a misurazioni dirette della velocità. Dalla Figura 2.2 si può notare la dispersione dei dati sperimentali nel corso degli anni ed una tendenza alla convergenza di questi ultimi [9].

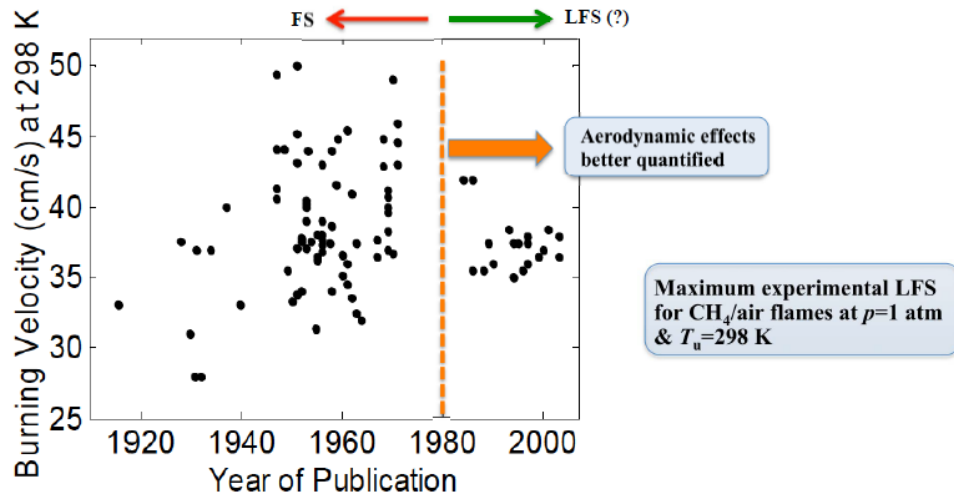


Figura 2.2: Esempio della dispersione dei dati sperimentali [9]

La dispersione, a volte, risulta essere notevole, e dal punto di vista numerico, dello stesso ordine di grandezza della velocità calcolata. Come si può notare dalla Figura 2.3 per le stesse condizioni di pressione, temperatura ed equivalent ratio (EGR nullo), la differenza fra i valori sperimentali ottenuti da Elia 2001 e Lowry 2011 sono di circa 8 cm/s, quindi un ordine di grandezza confrontabile con il valore della laminar flame speed di circa 40 cm/s.

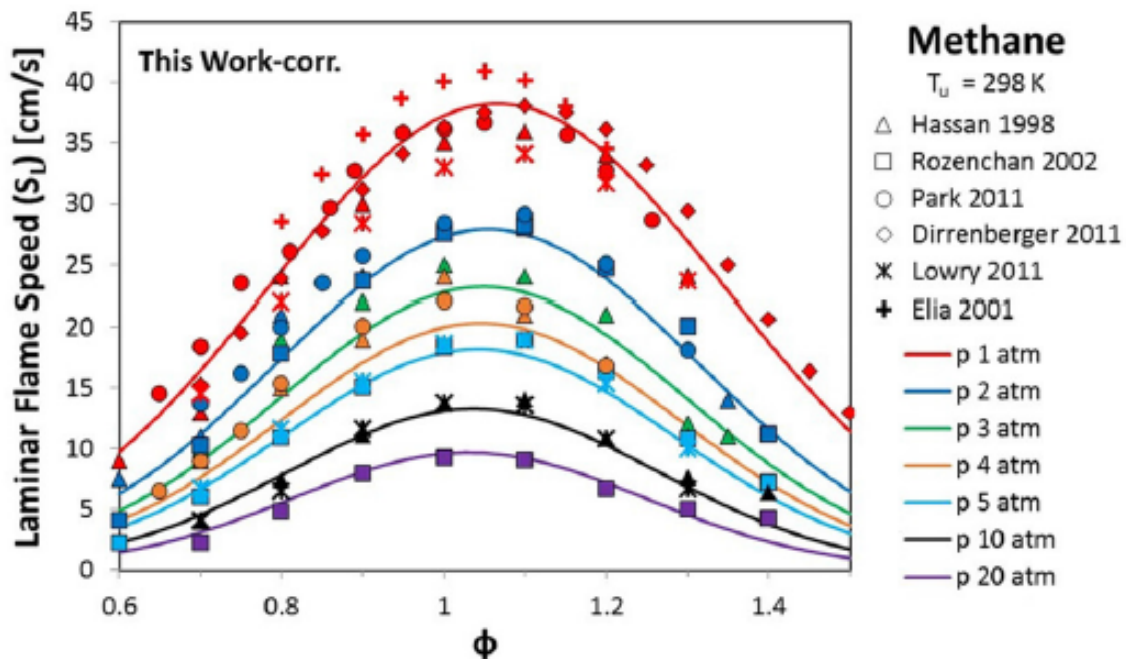


Figura 2.3: Dispersione dei dati sperimentali per la misurazione della LFS per una miscela di aria e metano a temperatura ambiente e per diversi valori di pressione e rapporto di equivalenza [7]

Il motivo di tale differenza è da ricercarsi nel metodo sperimentale scelto per la misurazione della velocità laminare, nelle ipotesi effettuate durante l'analisi dei dati sperimentali (ad esempio compressione isoentropica dei gas combusti o combustione isobara durante i primi stadi di propagazione) ma anche a monte, quindi durante la creazione stessa della miscela. Essa infatti viene calcolata e non misurata, quindi si realizza la miscela voluta sfruttando le pressioni parziali dei gas in gioco, ovviamente questa risulta essere la prima di una serie di fonti di incertezza che porterà alla misurazione della laminar flame speed. Inoltre molto spesso anche uno stesso metodo sperimentale conduce a valori differenti della grandezza in esame, come è possibile osservare dalla Figura 2.4, in cui sono riportati i dati sperimentali del $C_{12}H_{26}$, a pressione atmosferica e temperatura di 403 K, ottenuti con lo stesso metodo di misurazione della velocità.

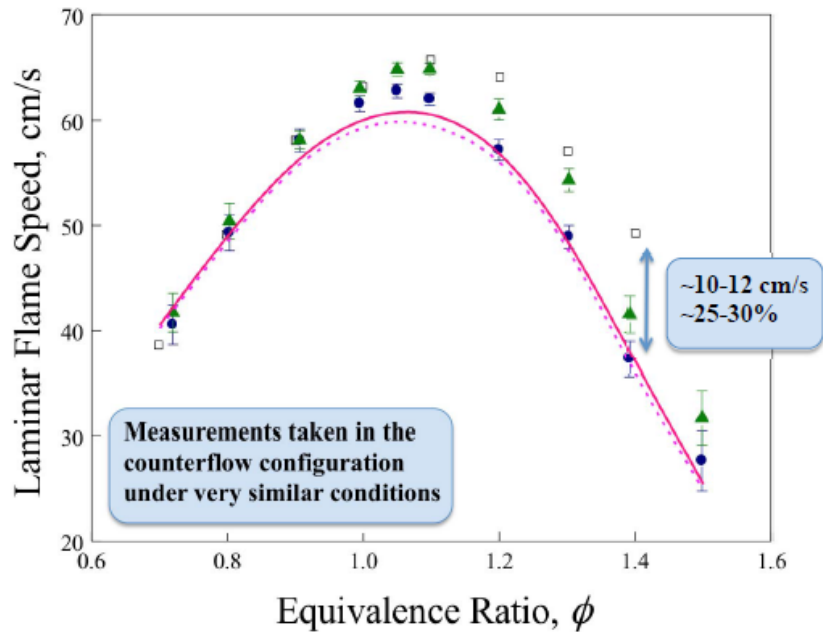


Figura 2.4: Misurazioni della laminar flame speed con la stessa configurazione counterflow ed in condizioni molto simili [9]

In Figura 2.4 si è specificato un metodo sperimentale per la misurazione della velocità laminare di propagazione del fronte di fiamma, il metodo counterflow, questo risulta essere uno dei metodi più utilizzati per la misurazione della grandezza in esame. In generale i metodi più utilizzati sono:

- Fiamma di Bunsen;
- Counterflow/Stagnation Flame;
- Heat flux;
- Bomba sferica/cilindrica/cuboidale (adatta particolarmente per misurazioni a pressioni maggiori di 10 atm, di particolare interesse per le macchine termiche).

2.2 Fiamma di Bunsen

Tale metodo per la misurazione delle LFS risulta essere sicuramente fra i più semplici fra quelli elencati precedentemente, in esso infatti basta conoscere due grandezze:

- La velocità con cui la miscela preformata abbandona l'ugello (u);
- L'angolo che forma il vertice della fiamma conica (α);

Per cui la flame speed può essere valutata con la seguente relazione:

$$FS = u \cdot \sin(\alpha) \quad (2.1)$$

Tale relazione può essere ricavata analizzando il fronte di fiamma generato da tale strumento. In Figura 2.5 è rappresentato uno schema del becco di Bunsen sulla sinistra, mentre sulla destra è rappresentata un'analisi delle velocità in gioco.

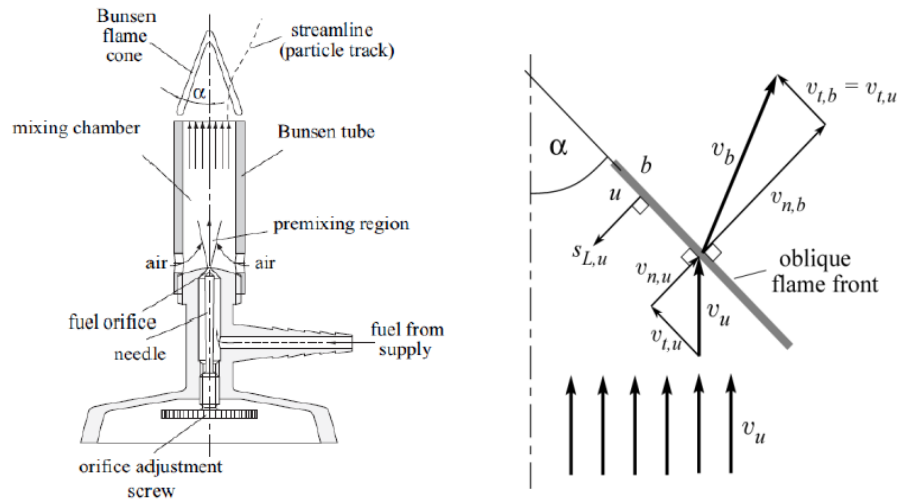


Figura 2.5: Becco di Bunsen [10]

Si può notare la presenza di un certo tratto di miscelamento all'interno dello strumento in analisi, finalizzata alla formazione della miscela prima che essa bruci in corrispondenza dell'ugello. La fiamma risulta essere di tipo conico con angolo al vertice pari ad α . Sulla destra della Figura 2.5, si può osservare la variazione della velocità normale al fronte una volta attraversato il fronte, in particolare, per la conservazione della portata massica, dovrà essere:

$$\rho_b v_b = \rho_u v_u \quad (2.2)$$

E quindi:

$$v_b = \frac{\rho_u}{\rho_b} v_u \quad (2.3)$$

Ed essendo la densità dei gas incombusti maggiore di quella dei gas combustibili, si avrà un aumento della velocità normale al fronte di fiamma. Per quanto riguarda la componente tangenziale, o parallela al fronte di fiamma, quest'ultima dovrà per forza di cose rimanere invariata per la conservazione della quantità di moto. Ciò comporterà una deflessione delle linee di corrente durante l'attraversamento del fronte di fiamma, come mostrato in Figura 2.5, dove con il tratteggio è rappresentata una *streamline* che attraversa il fronte di fiamma. La semplicità di tale metodo porta anche ad una serie di inconvenienti:

- La presenza di zone con dilatazione negativa (curvatura del fronte verso l'interno in corrispondenza delle pareti dell'ugello);
- Perdite di calore attraverso le pareti dell'ugello;
- Complessità in corrispondenza della punta della fiamma (da cui si estrae il parametro α) a causa delle linee di corrente e di complessi fenomeni diffusivi;
- Variabilità della LFS lungo le pareti del fronte di fiamma;
- Instabilità termo-fluidodinamiche;
- Impossibilità di poter utilizzare tale strumento a pressioni superiori a 10 atm.

Una soluzione alla dilatazione del fronte di fiamma potrebbe essere quella di adoperare Slot Bunsen Burner, cioè bruciatori particolari che però risentono molto delle oscillazioni dovute al fluido che circonda la fiamma durante la combustione.

2.3 Counterflow/Stagnation Flame Technique

In questo metodo l'obiettivo è quello di creare una superficie di ristagno (solitamente piana) grazie all'utilizzo di due getti contrapposti. Due sono le possibili configurazioni che possono essere create:

- Twin flame configuration: in questo caso due getti di miscela di aria e combustibile vengono "sparati" l'uno contro l'altro, creando due fronti di fiamma piani (Figura 2.6);
- Single flame configuration: dove un getto è di miscela di aria e combustibile ed il secondo è costituito da gas inerti, andando a creare un solo fronte di fiamma piano.

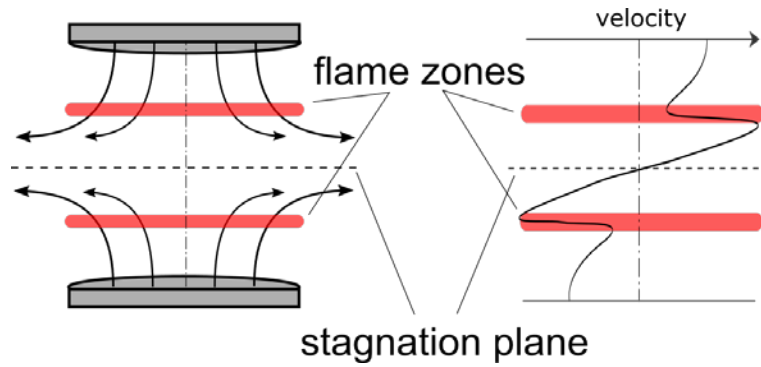


Figura 2.6: Twin flame configuration

Tale strumento presenta l'evidente vantaggio di andare a creare un fronte di fiamma piano, anche in questo caso bisogna tenere conto di piccole correzioni dovute allo stretch che inducono un importante fonte di errore sul calcolo finale della LFS. Infatti in Figura 2.7 è possibile osservare che il valore finale della velocità laminare di propagazione del fronte, indicata con S_u^0 , è ottenuta per estrapolazione fino al punto avente strain rate pari a zero, cioè riconducendo la fiamma ottenuta nella realtà ad un perfetto fronte di fiamma piano.

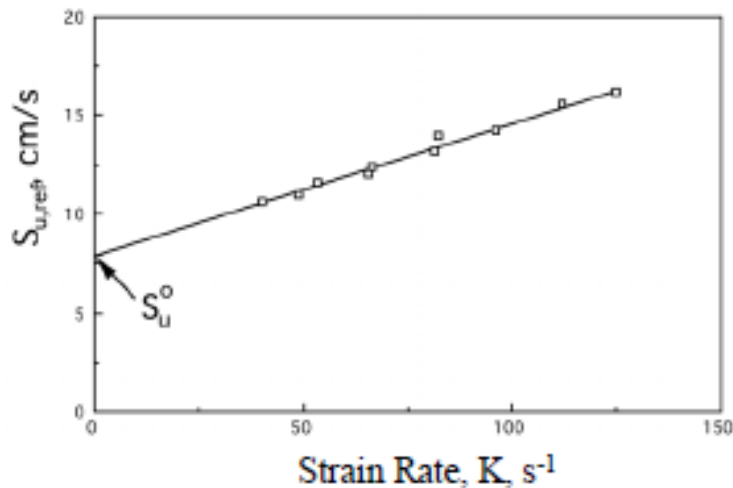


Figura 2.7: Procedura di estrapolazione per il calcolo della LFS a partire dai dati sperimentali [9]

I contro principali di tale metodo sono rappresentati dal fatto risulta essere molto complesso lavorare a pressioni maggiori di 10 atm, inoltre piccoli errori di allineamento del raggio laser (per la visualizzazione del fronte di fiamma), possono indurre a grossi errori sul valore finale della velocità di propagazione [9].

2.4 Heat flux method

Alla base di tale metodo per la misurazione della LFS ci sono i flussi termici fra piastre (rappresentate in Figura 2.8 in giallo), flusso di gas incombusti e fronte di fiamma (rappresentato in rosso).

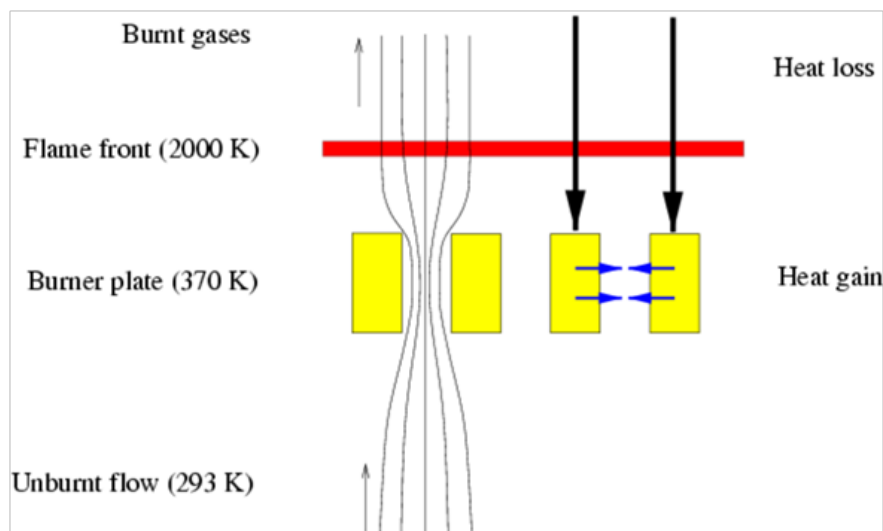


Figura 2.8: Schema generale del metodo Heat Flux

L'obiettivo è quello di calcolare la LFS di un fronte di fiamma adiabatico, quindi senza che ci siano scambi di calore con l'esterno o facendo in modo che gli scambi termici *netti* siano nulli a livello del bruciatore (o burner plate). Infatti se la velocità con cui fluiscono i gas incombusti è maggiore della LFS, allora si avrà che il calore ceduto dal burner plate ai gas è maggiore di quello che riceve dal fronte di fiamma. Nel caso in cui la velocità sia inferiore alla LFS si avrà ancora una situazione di squilibrio, per cui il calore che il burner plate riceve dal fronte di fiamma è maggiore di quello ceduto ai gas che lo attraversano. L'obiettivo è quindi quello di controllare il flusso della miscela in esame, di modo da avere un bilanciamento del calore ceduto ai gas combusti e del calore sottratto alla fiamma, di modo da ottenere una fiamma adiabatica. Molto spesso tale procedura può risultare complessa, motivo per cui si preferisce procedere per interpolazione della velocità di flusso laddove l'heat flux risulta essere nullo.

2.5 Bomba sferica e cilindrica

Quest'ultimo metodo risulta essere sicuramente il più importante fra quelli elencati precedentemente, perché permette la determinazione della velocità laminare in condizioni di pressione maggiore di 10 atm, e quindi di particolare interesse soprattutto per il settore motoristico. Infatti solitamente nei motori a combustione interna ad accensione comandata, la combustione ha luogo in una miscela preformata ad una pressione di fine fase di compressione pari a 15 atm circa, e quindi fondamentale risulta essere la determinazione della velocità di fiamma in queste condizioni. In Figura 2.9 è rappresentato uno schema costruttivo di una bomba sferica, in essa sono presenti due elettrodi fra i quali viene fatta scoccare una scintilla che darà inizio alla combustione della miscela presente in camera. Quindi per variare le condizioni fisiche con cui deve essere valutata la LFS, basta introdurre in camera la miscela alla temperatura e pressione desiderata; ovviamente bisogna tenere conto dei limiti costruttivi del contenitore sferico o delle finestre in esso presenti per il monitoraggio del fronte di fiamma [11].

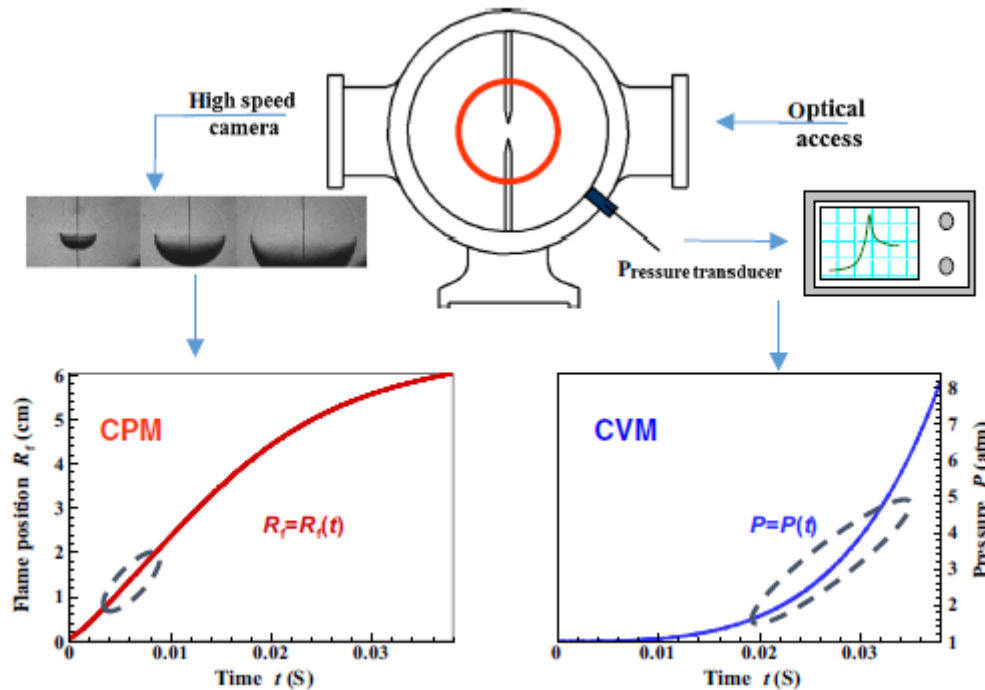


Figura 2.9: Possibili utilizzi di una bomba sferica per il calcolo della LFS. A destra Constant Volume Method. A sinistra Constant Pressure Method [11]

Come è possibile notare inoltre dalla Figura 2.9, due sono i metodi che in pratica vengono applicati per estrarre il valore della LFS da questo strumento:

- CPM: Constant Pressure Method;
- CVM: Constant Volume Method.

2.5.1 Constant pressure method/Unconfined Method

Come si può ancora notare dalla Figura 2.9, con questo metodo si va a sfruttare soltanto la prima parte dell'intera propagazione del fronte di fiamma, in questa parte si può assumere (ed il segnale di pressione a sinistra della Figura 2.9 ne è una conferma) che la miscela dei gas combusti rimanga a pressione costante. In seguito tale pressione tenderà ad aumentare per effetto della compressione da parte dei gas combusti alle spalle del fronte di fiamma, fenomeno che porta all'accumulo di un grosso quantitativo di miscela in un volume sempre più piccolo (Figura 1.19: Andamento della frazione di massa bruciata in funzione della frazione volumica bruciata). Tale metodo viene anche denominato *Unconfined Method*, in quanto, data la costanza della pressione durante i primi stadi di propagazione, è come se la fiamma non risentisse della propagazione in un ambiente chiuso. Tale assunzione (cioè supporre la pressione invariata) porterà ad un modo di calcolare la LFS completamente diverso da quello che verrà esposto per il constant volume method.

Solitamente per questa tipologia di metodo si ricorre all'utilizzo di una fotocamera in grado di catturare i fotogrammi della propagazione del fronte di fiamma e da essi estrarre il valore della LFS. Dall'ellisse, sempre in Figura 2.9, si può notare che i primissimi stadi di propagazione del fronte non vengano presi in considerazione da tale metodo, questo perché in tale fase il fronte di fiamma risulta essere particolarmente distorto, per cui anche l'analisi dello stretch rate risulta essere complessa, in quanto il fronte non ha ancora assunto una forma sferica. Dalla Figura 2.10 è possibile notare la forma del primo nucleo catturato dalla fotocamera durante la propagazione del fronte di fiamma.

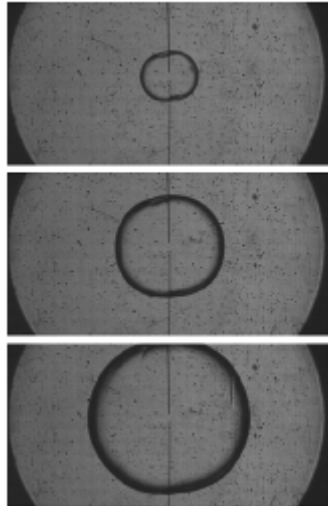


Figura 2.10: Sequenze di propagazione del fronte di fiamma all'interno di una camera sferica, riprese con una fotocamera Shilieren. La miscela in esame è una di n-eptano con $\Phi=1.2$ e $T=353\text{ K}$, timestep pari a 2.25 ms .

Tale fenomeno, ovvero l'impossibilità di utilizzare i dati iniziali, prende il nome di *ignition memory*, e rappresenta un importante inconveniente di tale metodo perché riduce i valori sperimentali a disposizione per il calcolo della LFS. Un vantaggio invece è rappresentato dal fatto che la velocità viene calcolata in maniera *diretta*, cioè sfruttando direttamente le immagini catturate durante la propagazione del fronte di fiamma. Altri metodi invece sfruttano altri segnali per reperire indirettamente il valore della LFS.

2.5.2 Constant Volume Method/Confined Method

Tale metodo risulta essere il duale di quello citato nel precedente sottoparagrafo, infatti qui si sfruttano soltanto gli ultimi step di propagazione del fronte di fiamma, dove la pressione dei gas incombusti inevitabilmente tende a crescere, così come la pressione in generale in camera. Se nel caso precedente si era parlato di *ignition memory*, in questo caso si parlerà di *wall effects*, a causa di questo effetto i dati degli ultimi millisecondi di propagazione del fronte risultano essere inutilizzabili. Per questo motivo l'ultima porzione del segnale di pressione in Figura 2.9 non è compresa all'interno dell'ellisse.

In questo metodo fondamentale risulta essere l'attendibilità del segnale di pressione, da esso infatti si ricaverà il valore della LFS in esame; in realtà l'accesso ottico viene comunque mantenuto (nei moderni dispositivi) per permettere un controllo del fronte di fiamma e verificare che esso sia sferico e liscio (*smooth*), come rappresentato in Figura 2.11.

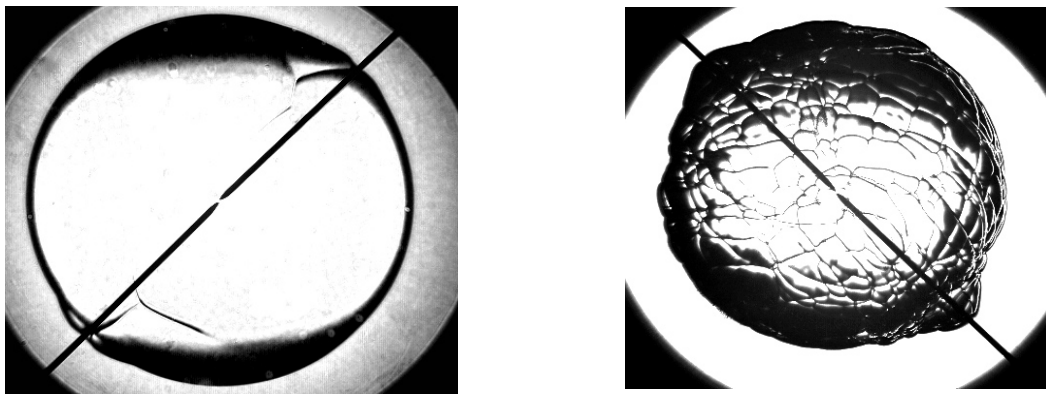


Figura 2.11: Confronto fra un fronte di fiamma liscio ed un fronte di fiamma corrugato per una miscela metano/aria $\phi=1$, $T=300\text{ K}$ $p=1\text{ atm}$ (sinistra) $p=5\text{ atm}$ (destra) a study on spherical expanding flame bla bla

Tale corrugamento del fronte prende il nome di *cellularity*, fenomeno che comporta un accrescimento dell'area del fronte di fiamma e quindi della velocità con cui esso si propaga, andando a falsificare la misura della LFS. Tale fenomeno risulta essere facilmente identificabile (e correggibile) nel caso in cui si utilizzi un CPM

(tramite l'utilizzo della *high speed camera*), difficilmente invece se si osserva il solo segnale di pressione. Motivo per cui si preferisce mantenere l'accesso ottico anche nel CVM, pur perdendo però in resistenza strutturale dell'intera camera sferica, in quanto gli accessi ottici limitano le pressioni massime in camera. Anche per questo metodo sperimentale per l'identificazione della LFS si ricorre a una serie di ipotesi ed approssimazioni non sempre verificate pienamente, anche in questo caso si ricorre all'estrapolazione che comporta, come nel caso del metodo counterflow, ad una importante fonte di errore.

2.6 Analisi dei dati sperimentali

Durante questo lavoro di tesi si è voluto comprendere il perché ci fosse questa dispersione di dati, cercando di comprendere quale fosse il più vicino alla realtà e quale fosse una sovrastima della LFS. Per fare ciò si è deciso di focalizzare l'attenzione soltanto su due metodi sperimentali, che inducono, come possibile osservare dalla Figura 2.3, al valore più alto e più basso della LFS per una miscela stechiometrica. Quindi sono stati presi in esame le misure di Elia 2001 e Lowry. In Tabella 2.1 sono riassunte le informazioni principali per entrambi gli esperimenti analizzati.

Autori	Anno	Combustibili analizzati	ϕ equivalent ratio	$T_u(K)$	$p_u(atm)$	Metodo
Elia et al.	2001	Metano, metano/diluenti	0.8-1.2	298-550	0.75-70	CVM con contenitore sferico
Lowry et al.	2011	Metano, etano, propano	0.7-1.3	298	1-10	CPM con contenitore cilindrico

Tabella 2.1: Confronto di range operativi e metodi di misura di Elia e Lowry

Prima di procedere con l'analisi dei singoli metodi nel dettaglio e quindi al confronto finale è importante sottolineare il fatto che Elia utilizzi un contenitore sferico, mentre Lowry uno cilindrico. In realtà bisogna tenere conto del fatto che Lowry utilizza un CPM, cioè un'analisi dei primissimi stadi di propagazione del fronte di fiamma, quindi è come se il fronte di fiamma non si accorgesse del confinamento cilindrico dovuto alle pareti della camera. Tale affermazione risulterà essere più chiara con un breve cenno al lavoro di *Burke et al.* [13]

2.6.1 Effetto del confinamento cilindrico sulla propagazione del fronte di fiamma [13]

Come è possibile osservare dalla Figura 2.12, il fronte di fiamma, per raggi del fronte inferiori al 30% del raggio del contenitore cilindrico (in Figura 2.12 indicato con r_w), non risentono del confinamento cilindrico. Tale osservazione risulta essere particolarmente interessante, soprattutto se si intende applicare un CPM (e cioè sfruttare i primi step di propagazione del fronte di fiamma), in quanto si andrebbe ad analizzare un fronte di fiamma che continua a rimanere sferico. Al contrario man mano che la propagazione del fronte in camera cilindrica prosegue, l'effetto del confinamento diventa importante, in particolare la velocità in direzione radiale tende a diminuire e quella in direzione assiale tende ad aumentare. Inoltre i gas incombusti non vengono compressi in maniera isotropa, si avrà quindi una velocità non nulla dei gas incombusti in corrispondenza delle pareti.

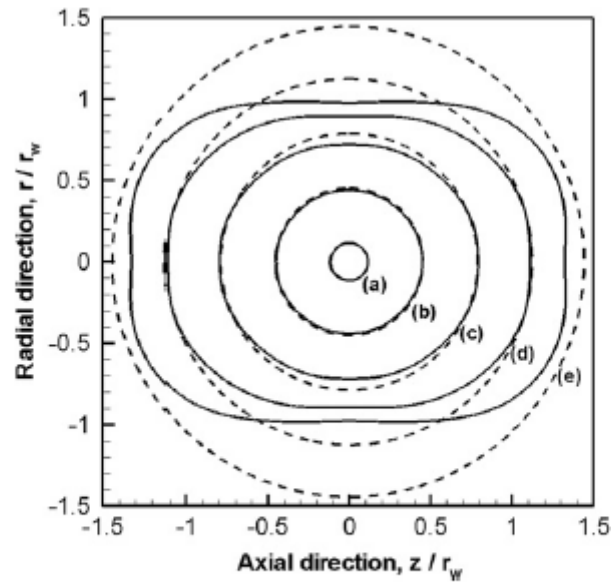


Fig. 5. Comparison of flame surface contours for a flame in a finite-length cylindrical chamber of aspect ratio, $z_w/r_w = 1.5$, and an unconfined flame for $\sigma = 8$ at (a) 0.002, (b) 0.044, (c) 0.086, (d) 0.128, (e) $0.170 r_w/s_u^0$.

Figura 2.12: Effetto del confinamento cilindrico durante i vari step di propagazione del fronte di fiamma [13]

Quindi, per concludere, pur trattandosi di camere diverse, Elia usa un contenitore sferico mentre Lowry usa un contenitore cilindrico, possiamo supporre che il contenitore cilindrico si comporti come uno sferico, nel caso in cui si utilizzi un constant pressure method o Unconfined Method, e quindi procedere al confronto pur trattandosi di geometrie differenti.

2.6.2 Elia et al. Constant volume method

Come preannunciato precedentemente, Elia usa una camera sferica di circa 15 cm di diametro ed in particolare usa un constant volume method. In Figura 2.13 si può notare la presenza dei due elettrodi (per innescare la combustione), della sede per il traduttore di pressione (dal cui segnale verrà ricavata la LFS) e della porta di caricamento della bomba.

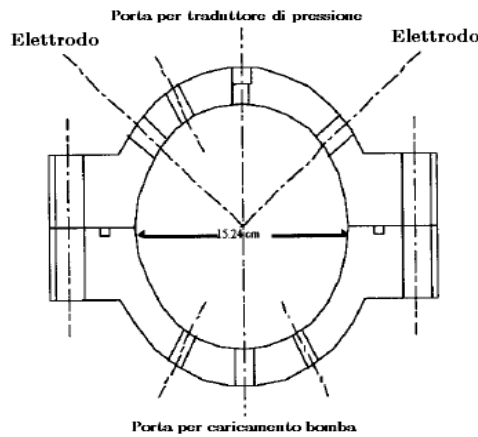


Figura 2.13: Rappresentazione schematica della bomba sferica utilizzata da Elia [14]

La relazione alla base di tale metodo risulta essere la seguente:

$$S_u = m \cdot v_u \cdot \dot{x} / A_f \quad (2.4)$$

Dove:

- S_u è la velocità del fronte di fiamma (essa dovrà essere corretta in un secondo momento per ricondurre il fronte di fiamma sferico ad uno piano, con stretch rate nullo).

- m rappresenta la massa totale di miscela contenuta in camera, tale grandezza, seppur apparentemente di semplice determinazione, rappresenta una fonte di errore in quanto la massa non viene misurata ma calcolata dalle pressioni parziali dei vari composti che compongono la miscela
- v_u rappresenta il volume specifico dei gas incombusti, tale grandezza varia durante la propagazione del fronte di fiamma, a causa della compressione cui sono soggetti (si assume che questi vengano compressi isoentropicamente dai gas combust). Esso viene determinato a partire dal segnale di pressione in camera miscela e tramite l'utilizzo delle tabelle JANAF ed un codice di equilibrio chimico;
- $\dot{x}$ indica la il tasso di frazione di massa bruciata, cioè la velocità con cui varia la frazione di massa bruciata nel tempo, il modo con cui tale valore viene estratto verrà spiegato in seguito.
- A_f indica la superficie del fronte di fiamma, che ovviamente aumenta man mano che la propagazione del fronte di fiamma prosegue. Essa viene determinata a partire dalla frazione di massa bruciata, da cui, nota la densità dei gas combust e non istante per istante, si risale alla frazione volumica di massa bruciata:

$$V_b = \sum v_{b,i} m_{b,i} = \frac{4}{3} \pi r_f^3 \rightarrow r_f$$

Quindi, dal segnale di pressione si risale al valore del raggio della sfera istante per istante e quindi alla superficie A_f istante per istante. Per quanto riguarda la velocità con cui varia la frazione di massa bruciata, essa viene determinata per via numerica andando a risolvere per ogni time-step l'equazione di conservazione di massa ed energia:

$$\frac{V}{m} + \frac{A\delta}{m} = \sum_{i=0}^{n-1} v_{b,i} x_i + v_{b,n} x_n + \left(1 - \sum_{i=0}^{n-1} x_i - x_n\right) v_u \quad (2.5)$$

$$\frac{E}{m} + \frac{Q}{m} = \sum_{i=0}^{n-1} e_{b,i} x_i + e_{b,n} x_n + \left(1 - \sum_{i=0}^{n-1} x_i - x_n\right) e_u \quad (2.6)$$

Si possono fare alcune importanti considerazioni:

- Con il termine $\left(\frac{A\delta}{m}\right)$ si vuole indicare una frazione di miscela che non partecipa alla combustione. Come annunciato precedentemente, per effetto del wall-effect (o effetto parete), la fiamma non riuscirà a coinvolgere la frazione di miscela in corrispondenza delle pareti in quanto a temperatura troppo bassa per il completamento delle reazioni. Quindi, supposto uno spessore δ , il volume della miscela sarà pari a quella del guscio cilindrico di dimensioni paria ad $A\delta$ dove con s_i indica la superficie interna del contenitore sferico.
- Con il termine $\left(\frac{Q}{m}\right)$ si indica la potenza termica dispersa verso l'ambiente, quindi uscente dal sistema. Per quanto si possano prendere accorgimenti per isolare termicamente la bomba, di modo da ricreare una situazione di fiamma adiabatica, ci sarà sempre una quantità di calore uscente dal sistema, seppur di quantità trascurabile, come riportato in Figura 2.14. Si può notare, infatti, come tale quantità sia assolutamente trascurabile durante i primi stadi di propagazione (si ricordi infatti che il range di analisi per un CPM è per raggi del fronte inferiori al 30% del raggio della bomba). Anche negli ultimi stadi, quindi di particolare interesse per un CVM, le perdite energetiche sono inferiori all'1% dell'intera energia rilasciata dalla combustione, quindi il fenomeno risulta essere molto vicino all'adiabatico.

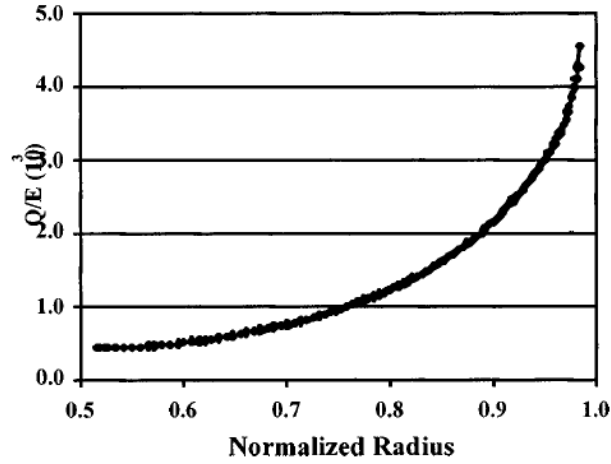


Figura 2.14: Calore uscente dal sistema normalizzato rispetto all'energia derivante dalla combustione, durante gli ultimi step di propagazione del fronte di fiamma [14]

Ritornando alle equazioni (2.5) e (2.6), per ogni step vengono valutati i valori di T_b e m_b , relativamente temperatura e massa della frazione di gas combustibili presente in camera. Le equazioni (2.5) e (2.6), non sono altro che la forma discretizzata nello spazio (e cioè riferita ad ogni guscio sferico con cui si suddivide la regione dei gas combustibili) delle equazioni di conservazione di massa e volume:

$$\frac{V}{m} + \frac{A\delta}{m} = \int_0^x v_b dx' + \int_x^1 v_u dx' \quad (2.7)$$

$$\frac{E}{m} - \frac{Q}{m} = \int_0^x e_b dx' + \int_x^1 e_u dx' \quad (2.8)$$

È importante sottolineare che un approccio multizona risulti essere fondamentale per un problema di questo tipo, se si fosse adottato un metodo *two-zone*, dove si suppone che la temperatura dei gas combustibili sia uniforme, così come quella dei gas incombusti, sarebbe stato trascurato il gradiente termico che si viene a creare nella regione dei gas combustibili. Nel modello multizona si suddivide la regione dei gas combustibili in diversi gusci sferici, all'interno dei quali si suppongono uniformi le grandezze fisiche (come temperatura, pressione, densità ed energia interna) e si suppone anche che ogni guscio sferico abbia raggiunto le condizioni di equilibrio chimico.

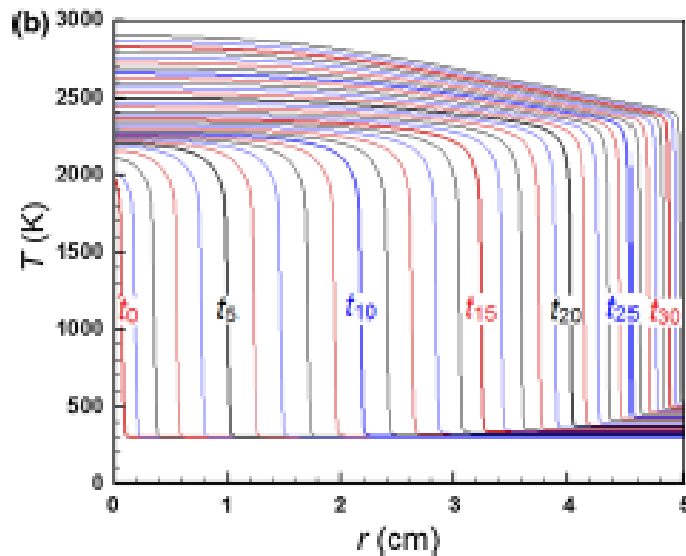


Figura 2.15: Evoluzione della temperatura in camera durante per diversi istanti di propagazione del fronte di fiamma per una miscela stechiometrica di metano/aria [11]

Dalla Figura 2.15 è possibile notare la presenza del gradiente termico nella regione dei gas combusti durante gli ultimi step di propagazione del fronte, in particolare dopo 15 ms dallo scoccare della scintilla non è più possibile assumere che la temperatura nella regione dei gas combusti sia uniforme. Si può osservare che nell'ultimo step la differenza di temperatura fra la porzione di miscela che ha appena bruciato (in corrispondenza del fronte di fiamma e quindi del gradino di temperatura) e della prima porzione di miscela che ha bruciato, sia pari a circa 700 K. Ciò si spiega, tenendo conto del fatto che i gas combusti avendo una densità minore, tenderanno ad espandersi ed andranno a comprimere non solo i gas che devono ancora bruciare, ma anche quelli che hanno bruciato precedentemente (vedi Figura 1.18).

L'ultimo step, per il calcolo finale della LFS, prevede la correzione dovuta allo *stretch rate* con la seguente relazione:

$$S_L = S_u + C\alpha \quad (2.9)$$

$$\alpha = \frac{1}{A_f} \left(\frac{dA_f}{dt} \right) = 2 \left(\frac{\dot{r}_f}{r_f} \right) \quad (2.10)$$

Dove:

- S_L indica la unstretched burning velocity (cioè fronte di fiamma ricondotto ad un fronte di fiamma piano);
- S_u rappresenta la stretched burning velocity, cioè la velocità calcolata con fronte di fiamma sferico;
- C è un coefficiente correlato alla lunghezza di Markestein;
- α rappresenta lo stretch rate [1/s]

Come si può notare dall'andamento dei dati sperimentali in Figura 2.16, la dilatazione del fronte di fiamma risulta essere un fenomeno particolarmente rilevante durante i primi stadi di propagazione (quindi per un CPM deve essere preso in considerazione tale fenomeno). Nel caso di un CVM l'andamento dello stretch rate al variare del raggio normalizzato, risulta essere pressoché lineare.

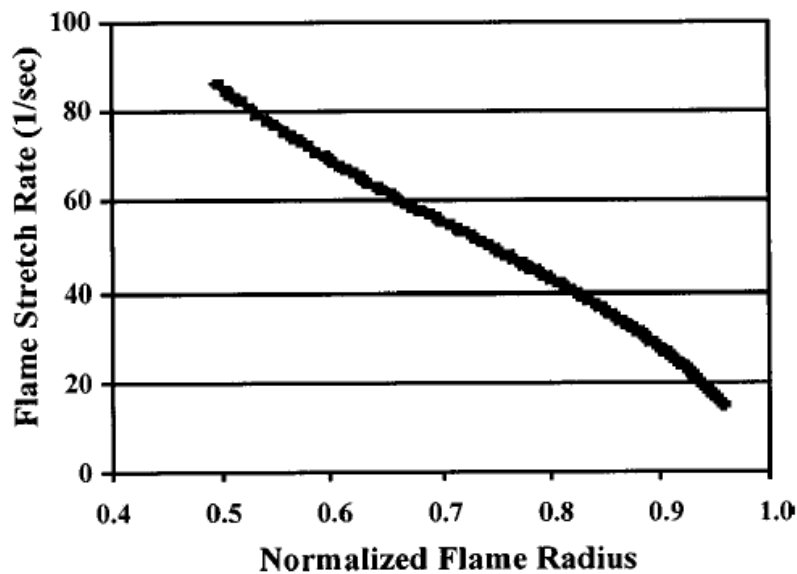


Figura 2.16: Andamento del flame stretch rate al variare del raggio del fronte di fiamma normalizzato, per una miscela stechiometrica di metano/aria a $P_i=1$ atm e $T_i=298$ K [14]

Quindi, grazie alla relazione (2.7) si ricondurrà un fronte di fiamma sferico ad un fronte di fiamma piano, avente stretch rate nullo. L'effetto finale sulla LFS risulta essere pari a 1.0 cm/s per raggi di propagazione del fronte piuttosto piccoli, e pari invece a 0.2 cm/s quando il fronte di fiamma raggiunge i pressi delle pareti del contenitore sferico.

2.6.3 Lowry et al. Constant Pressure Method

Come riassunto in Tabella 2.1, Lowry utilizza un approccio completamente diverso per il calcolo della LFS, in particolare esso usa un CPM. Dal punto di vista dell'apparato sperimentale esso risulta essere completamente diverso, a partire dalla forma del contenitore entro cui avviene la combustione, per Elia è stato utilizzato un contenitore sferico mentre per Lowry un contenitore cilindrico. Alla luce però del paragrafo 2.6.1,

si può assumere che il contenitore cilindrico si comporti come uno sferico, nel caso in cui si applichi un CPM. Uno schematico dell'apparato sperimentale è rappresentato in Figura 2.17.

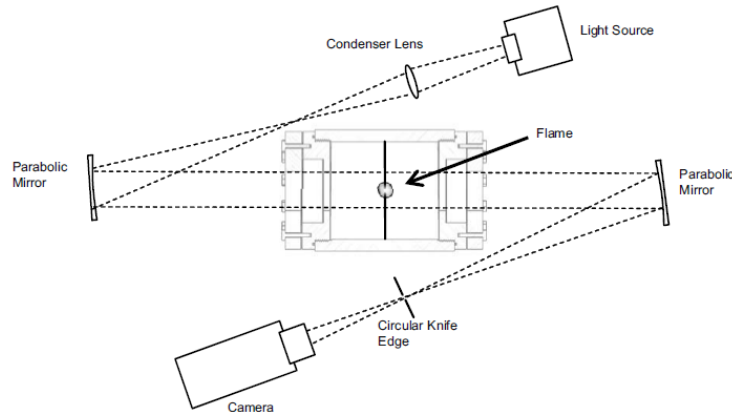


Figura 2.17: Apparato sperimentale utilizzato da Lowry con high speed camera Shlieren [15]

Si può notare la presenza dell'high speed camera come sostituto del trasduttore di pressione (in realtà il trasduttore viene comunque mantenuto per monitorare la combustione) per la determinazione della LFS, in questo caso, infatti, la LFS viene misurata direttamente analizzando le immagini catturate dalla videocamera, e non in via indiretta a partire dal segnale di pressione. Per quanto riguarda le dimensioni della camera cilindrica esse sono:

- $D_i=30.5$ cm;
- $D_e=38.1$ cm;
- $L=35.6$ cm.

Il range utilizzato per il calcolo della LFS è per raggi del fronte di fiamma che vanno da 0.7 cm a 4.5 cm, ciò implica l'utilizzo di raggi del fronte di fiamma inferiori al 30% del raggio della camera in considerazione e quindi il poter trascurare la crescita di pressione dei gas incombusti durante la propagazione del fronte. Infatti come si evince dal lavoro *Chen and Ju*, una crescita del 5% della pressione può indurre ad un errore sulla LFS pari a 4%; in questo esperimento invece, la crescita di pressione è inferiore al 3%, quindi l'effetto sulla LFS finale può sicuramente essere trascurato. In Figura 2.18 si può notare la porzione di evoluzione del fronte di fiamma utilizzata da tale metodo, e si può osservare come la crescita del segnale di pressione sia inferiore al 3% della pressione iniziale.

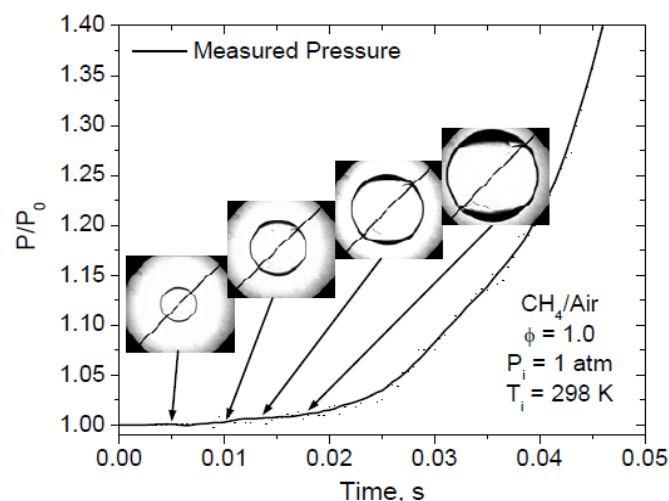


Figura 2.18: Posizione del fronte di fiamma rispetto all'andamento della pressione in camera.

È bene sottolineare che tale segnale di pressione rappresenta sia la pressione dei gas combusti sia quella dei gas incombusti; questo perché trattasi di un fenomeno di *deflagrazione* dove si può assumere che la pressione vari in maniera uniforme durante l'evoluzione della combustione.

In Figura 2.19 si può notare come la pressione non subisca nessun salto (a differenza della temperatura), nell'attraversare il fronte di fiamma; inoltre si può notare che per tempi inferiori ai 15 ms, la pressione in camera rimane pressoché costante e pari a quella cui si trovava la miscela al momento dell'innesco della combustione.

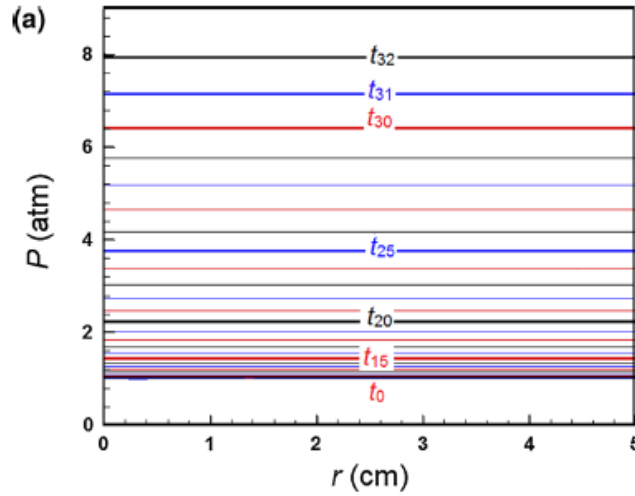


Figura 2.19: Andamento della pressione in camera per diversi istanti di propagazione del fronte di fiamma. Andamenti ottenuti mediante una simulazione two-zone della combustione in camera sferica, di una miscela di metano/aria, stechiometrica ed a NTP [11]

Ciò è in perfetto accordo con quanto riportato in Figura 2.18, in cui la crescita della pressione normalizzata (per la stessa miscela di aria/combustibile alle stesse condizioni iniziali) risulta essere trascurabile, come richiesto dal CPM o Unconfined Method.

Per quanto riguarda gli step per la determinazione della LFS seguiti da Lowry *et al.* risultano essere i seguenti:

1. Acquisizione delle immagini del fronte di fiamma durante la sua propagazione in camera;
2. Analisi delle immagini (*image post-processing*) per la determinazione del raggio del fronte di fiamma mediante un algoritmo di “best-fit”, in grado di determinare il raggio del fronte che meglio approssima quello reale. Tale algoritmo di “best-fit”, si basa sulla minimizzazione della distanza euclidea fra i punti reali e la circonferenza, il termine da minimizzare risulta essere il seguente:

$$J = \sum_{i=1}^n (d_i - r)^2 \quad (2.11)$$

Dove $d_i = \sqrt{(x_i - x)^2 + (y_i - y)^2}$ rappresenta la distanza euclidea fra i punti $P(x_i, y_i)$ ed il centro della circonferenza $C(x, y)$. È importante sottolineare che in questa fase di determinazione del raggio del fronte, è possibile tenere conto di un effetto che può alterare il valore della LFS, ovvero il *buoyancy effect* (o effetto galleggiamento). Tale fenomeno risulta essere particolarmente critico per quelle miscele aventi una bassa velocità di propagazione del fronte di fiamma (ad esempio per miscele particolarmente ricche o povere); in tal caso si avrebbe un effetto di movimentazione del fronte di fiamma verso l'alto, non dovuto alla propagazione del fronte ma ad un galleggiamento della frazione dei gas combusti aventi densità inferiore [15].

3. Utilizzando la relazione seguente:

$$R_f = \underbrace{S_b^0}_b t - 2 \underbrace{L_{m,b}}_{m,b} \ln(R_f) + cost \quad (2.12)$$

Grazie ad una regressione lineare, vengono determinati i valori della unstretched flame speed dei gas combusti e della lunghezza di Markstein. La relazione deriva dalle seguenti tre relazioni:

$$S_b = \frac{dR_f}{dt} \quad (2.13)$$

$$S_b = S_b^0 - L_{m,b} \alpha \quad (2.14)$$

$$\alpha = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} = \frac{1}{4\pi R^2} \frac{d(4\pi R^2)}{dt} = \frac{2}{R} \frac{dR}{dt} \quad (2.15)$$

Quindi sostituendo la (2.15) nella (2.14), ed integrando la (2.14) rispetto al tempo, si ottiene la (2.12).

4. Calcolo della *unburned unstretched flame speed*, essa viene determinata a partire da S_b^0 e dividendo per σ :

$$S_{L,u}^0 = \frac{S_{L,b}^0}{\sigma} \quad (2.16)$$

Dove:

$$\sigma = \frac{\rho_u}{\rho_b} \quad (2.17)$$

Le relazioni e (2.14) derivano dalla conservazione della massa, infatti:

$$S_{L,u}^0 \cdot A \cdot \rho_u = S_{L,b}^0 \cdot A \cdot \rho_b \quad (2.18)$$

Dove con A si indica la superficie del fronte di fiamma, che risulta essere in comune sia ai gas combusti che ai gas incombusti e pertanto la stessa. Quindi tramite semplici passaggi si ottiene la relazione (2.13) e quindi la laminar flame speed.

2.6.3.1 Cellularity ed accelerazione del fronte di fiamma

Anche in questo caso si può verificare il fenomeno di cellularity descritto precedentemente e rappresentato in Figura 2.11. Nel caso del lavoro di *Lowry et al.* si è proceduto ad un'analisi del residuo, cioè della differenza fra il raggio misurato tramite il post processing delle immagini acquisite, ed il raggio predetto (per ogni time step), dalla relazione (2.14). Il risultato è rappresentato in Figura 2.20.

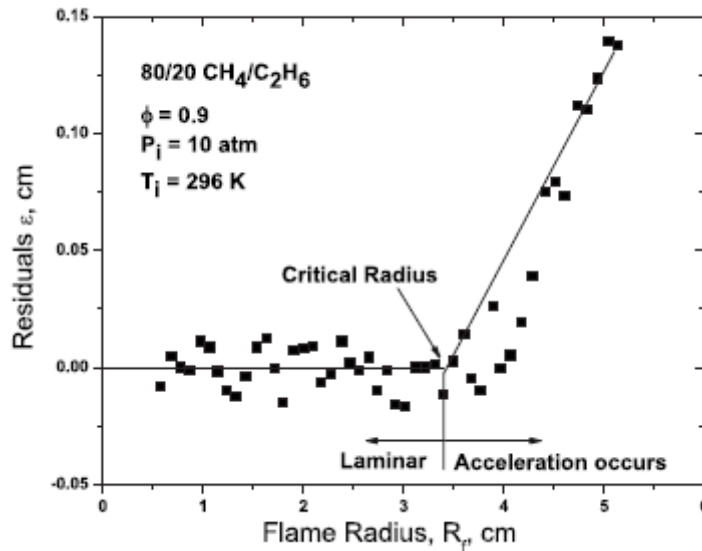


Figura 2.20: Rappresentazione del residuo durante la propagazione del fronte di fiamma [15]

Si può notare che in corrispondenza del gomito della curva si verifica un'accelerazione della velocità di propagazione del fronte di fiamma, dovuto a fenomeni di instabilità o di cellularity (corrugamento del fronte di fiamma e quindi accelerazione nella propagazione del fronte). Quindi l'analisi del residuo ϵ permette di identificare il momento in cui il fronte non si propaga più con velocità laminare e permette anche di definire il range di dati sperimentali su cui bisogna lavorare (in questo caso per raggi del fronte che vanno da 0.5 cm a 3.3 cm).

2.6.4 Confronto fra i due metodi sperimentali

Nella tabella seguente vengono riassunti i principali fenomeni che influenzano la LFS, viene specificato quale autore abbia preso in considerazione il relativo fenomeno ed in base al colore l'impatto che ha sulla determinazione della LFS finale.

Effects:	Elia (Constant Volume)	Lowry (Constant pressure)
Radiation	NO (but important in this stage of combustion, high concentration of CO ₂ and H ₂ O in the chamber) Increase when LFS decrease	NO (but in the first stage of flame propagation the radiation effect could be neglected ([CO ₂] and [H ₂ O] is negligible)) Increase when LFS decrease
Buoyancy	NO (but important for LFS lower than 15 cm/s)	YES (thanks to the fitting methodology)
Heat loss	YES	NO (but they are negligible during all the combustion, lower than)
Stretch	YES (but negligible)	YES (important)
Cellularity (Flame front wrinkling) → flame acceleration	NO (no optical access)	YES (thanks to optical access)
Confinement (pressure rise during the combustion)	YES (multi-zone model)	NO (the pressure rise is a source of negligible error, if it is under 5%)

Tabella 2.2: Confronto fra i due metodi sperimentali in analisi

Per quanto riguarda il *radiation effect* (o irraggiamento) si può notare come nessuno dei due prenda in considerazione tale fenomeno. Il motivo per cui nella colonna di Elia è rappresentato in rosso deriva dal fatto che trascurare l'irraggiamento in questo stadio della combustione può portare a grossi errori sulla LFS. Questo perché i principali responsabili di questo meccanismo di assorbimento e rilascio di energia sono l'anidride carbonica e l'acqua prodotti dalla combustione; quindi durante i primi stadi di propagazione si avranno modeste quantità di questi composti in camera e quindi trascurabili assorbimenti e rilasci di energia. In entrambi i casi, non considerare l'effetto della radiation porta ad una sovrastima della LFS perché si arriverebbe ad una temperatura di fiamma maggiore della reale e quindi ad una maggiore velocità di propagazione del fronte di fiamma.

Il secondo aspetto in analisi, che si può osservare dalla Tabella 2.2, riguarda l'effetto di galleggiamento, cioè la creazione di una componente verticale di velocità dei gas combusti, dovuta alla diversa densità dei gas presenti in camera. Tale effetto risulta tanto più rilevante quanto più le velocità di propagazione del fronte risultano essere basse (indicativamente inferiori ai 15 cm/s). Nel caso di Elia tale fenomeno non è preso in considerazione, mentre in Lowry si durante il secondo step di image post-processing.

Le perdite di calore, sebbene non vengano considerate in Lowry, sono rappresentate in verde perché trattasi di un CPM, e, come si può osservare dalla Figura 2.14, per i primi stadi di combustione, risulta essere assolutamente trascurabile (minore all'1% dell'energia totale).

Anche l'effetto di corrugamento (o wrinkling) del fronte di fiamma può alterare notevolmente il valore finale della LFS e questo viene preso in considerazione in Lowry (mediante l'analisi del residuo ϵ) ma non in Elia et al.

Come ultimo termine di confronto si può osservare la crescita di pressione dei gas combusti, che in Lowry non viene presa in considerazione, si assume che il fronte si propaghi in un ambiente inconfinato, almeno per i primi momenti di propagazione del fronte di fiamma. Quindi è rappresentato in verde, nonostante non venga preso in considerazione, perché, secondo Chen and Ju, l'errore sulla LFS, derivante dal prendere in considerazione la crescita di pressione, è inferiore al 3% e quindi trascurabile.

2.6.5 Conclusioni

Quindi si può concludere che il metodo più accurato sia il metodo utilizzato da Lowry (ovvero CPM) per diverse motivazioni principali:

- Radiation effect preso in considerazione;
- Buoyancy effect preso in considerazione;
- Calcolo della LFS in maniera diretta e non in maniera indiretta mediante l'utilizzo del segnale di pressione, codici di equilibrio chimico ed assunzioni, come compressione isoentropica dei gas combusti e quella di gas ideali;
- Cellularity presa in considerazione.

Inoltre una possibile spiegazione della sovrastima dei valori ottenuti col CVM (vedi Figura 2.3) potrebbe proprio essere il fatto di aver trascurato il radiation effect, che porterebbe ad una diminuzione della temperatura del fronte e quindi un rallentamento del fronte di fiamma. Quindi nelle successive fasi di tale lavoro di tesi , ed in particolare durante la fase di confronto dei dati numerici con i dati sperimentali, verrà prestata particolare attenzione a quale dei due set di dati analizzati in questo paragrafo risulta essere più prossimo il valore numerico.

3 Cinetica chimica: impostazione delle simulazioni e risultati

3.1 LOGE research

LOGE research rappresenta un tool di LOGE, finalizzato allo studio di flussi reattivi mediante l'utilizzo di complessi modelli di cinetica chimica. Esso permette di simulare le combustioni tramite dettagliati meccanismi chimici per una grande varietà di applicazioni ingegneristiche; permette, inoltre, di simulare diverse tipologie di reattori (constant volume, constant pressure), ma anche la combustione in camera di combustione ed anche di predire la formazione di NO_x e SOOT derivante dalla combustione. In questo lavoro di tesi tale programma è stato utilizzato per diversi scopi, tutti però partono dalla determinazione della LFS mediante la risoluzione delle equazioni di cinetica chimica. Infatti, come accennato precedentemente, la LFS può essere o misurata (tramite diverse procedure sperimentali esposte precedentemente) o calcolata mediante la simulazione della cinetica chimica delle reazioni che coinvolgono l'intero processo di combustione. In questo lavoro di tesi, LOGE è stato utilizzato per la determinazione della LFS per diverse condizioni iniziali e per due diversi meccanismi chimici:

- ARAMCO 2.0 ;[16] [17] [18]
- GRI-mech 3.0 [19][20] ;

Utilizzando come combustibile il metano e come comburente l'aria con concentrazioni standard di ossigeno ed azoto. In particolare è stata simulata la LFS di un fronte di fiamma piano di lunghezza infinita (freely flat propagating flame) che separa il semipiano dei gas combustibili da quello dei gas incombusti, per una miscela premiscelata di metano ed aria. Gli obiettivi delle simulazioni sono stati molteplici:

1. Creare una libreria di valori di LFS al variare di diversi parametri fisici, in particolare dosatura, EGR, temperatura e pressione iniziale;
2. Effettuare un confronto fra i meccanismi Aramco 2.0 e GRI-mech 3.0 e capire quale meccanismo si avvicinasse maggiormente ai dati sperimentali precedentemente collezionati;
3. Trovare una correlazione, fittando i dati ottenuti dalle simulazioni, che ci permettesse di trovare il valore della LFS semplicemente utilizzando una formula, evitando il dover ricorrere a simulazioni di cinetica chimica.

3.2 Creazione della libreria con LOGEresearch

Il primo step prevede la creazione di una libreria di LFS al variare di EGR, dosatura, pressione e temperatura. In Tabella 3.1, sono riassunti i range delle grandezze in esame.

Parametro	Intervallo analizzato	Passo di discretizzazione	Numero di punti
Pressione iniziale [bar]	1-200	Da 1 a 20 bar → step 1 bar Da 20 a 100 → step 10 bar Da 100 a 200 → step 20 bar	33
Temperatura iniziale [K]	300-1100	Step 100 K	9
Dosatura [-]	1	-	1
EGR [%]	0-50	Step 10 %	6

Tabella 3.1: Range di variabilità dei parametri con cui sono state eseguite le simulazioni

Quindi in totale sono stati simulati 1782 casi differenti.

Prima di eseguire le varie simulazioni, sono stati eseguiti una serie di step intermedi, come suggerito dal manuale di LOGE.

Innanzitutto bisogna scegliere il meccanismo di reazione con cui verranno simulate le reazioni e verrà risolta la cinetica chimica delle reazioni in considerazione. Esso si articola in tre parti differenti:

- **Gas phase data:** esso è un file contenente informazioni degli elementi e delle specie che partecipano al meccanismo di reazione. Esso contiene anche la lista delle reazioni che verranno risolte dal meccanismo di reazione scelto. La principale sfida nella creazione di un meccanismo di reazione consiste proprio nella scelta delle reazioni che partecipano alla combustione, optando anche per

l'eliminazione di alcune reazioni che non danno particolare contributo al fenomeno della combustione, ma che comunque avvengono durante essa.

Per ogni reazione contenuta nel suddetto file, di cui è riportato un esempio in Figura 3.1, sono riportati i corrispondenti valori dei coefficienti A , n e E_a , che compaiono nella legge di Arrhenius per la simulazione della cinetica delle reazioni. Si ricordi, infatti che il coefficiente k di Arrhenius è pari a:

$$k = AT^n e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (3.1)$$

ELEMENTS				
C	H	O	N	AR
END				
SPECIES				
H	O	OH	H2O	H2O2
CH	HCO	CH2-P	CH2-S	CH2O
CH3	CH3O	CH2OH	CH3O2	CH4
CH3OH	CH3O2H	C2H	C2O	HCCO
C2H2	CH2CO	C2H3	CH2CHO	CH3CO
C	CO	CO2	H2	H2O
O2	AR	N2		
END				
REACTIONS				
!-----				
!Reaction	A		n	Ea
!-----				
H+O2=O+OH	2.000E+14	0.00	1.679E+04	
O+H2=H+OH	5.100E+04	2.67	6.282E+03	
OH+H2=H+H2O	1.000E+08	1.60	3.296E+03	
OH+OH=O+H2O	1.500E+09	1.14	1.003E+02	
H+HO2=OH+OH	1.500E+14	0.00	1.003E+03	
H+HO2=H2+O2	2.500E+13	0.00	6.927E+02	
H+HO2=O+H2O	3.000E+13	0.00	1.720E+03	
O+HO2=OH+O2	1.800E+13	0.00	-4.060E+02	
...	...	...	...	
END				

Figura 3.1: Struttura di un gas phase data file

- **Molecular data:** tale file elenca le seguenti sei grandezze per ogni specie contenuta nel meccanismo di reazione:
 - Nome della specie chimica
 - Indicatore della struttura della specie (0 indica un atomo, 1 una molecola lineare, 2 una molecola non lineare o ramificata);
 - Due parametri che descrivono l'andamento del potenziale di Lennard diviso per la costante di Boltzmann e per il valore del diametro di collisione;
 - Il momento del legame di dipolo;
 - La polarizzabilità;
 - Il numero di collisioni rotazionali a 298 K;

H	0	0.145E+03	0.205E+01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
O	0	0.800E+02	0.275E+01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
OH	1	0.800E+02	0.275E+01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
H2O	2	0.107E+03	0.346E+01	0.000E+00	0.000E+00	0.100E+01
H2O2	2	0.107E+03	0.346E+01	0.000E+00	0.000E+00	0.380E+01
CH	1	0.800E+02	0.275E+01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
HCO	2	0.498E+03	0.359E+01	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
...						

Figura 3.2: Esempio di molecular phase data file

- **State Function Data:** LOGEresearch calcola le funzioni di stato, come entalpia e calore specifico, grazie l'utilizzo di polinomi. Questo tipo di file, *state function data file*, contengono i coefficienti di questi polinomi, anche denominati NASA coefficients. Ad esempio, per quanto riguarda il calore specifico a pressione costante, per la specie i-esima, esso può essere espresso in funzione della temperatura, con la seguente relazione:

$$\frac{C_{p,i}}{R_0} = a_{i,1} + a_{2,i}T + a_{3,i}T^2 + a_{4,i}T^3 + a_{5,i}T^4 \quad (3.2)$$

Dove i coefficienti del polinomio della specie i-esima sono salvati nello state function data file.

È importante sottolineare che qualora si volesse simulare con un meccanismo diverso (ad esempio GRIMech3.0 al posto di Aramco 2.0), bisogna caricare i 3 file precedentemente esposti relativi al meccanismo GRIMech 3.0.

Una volta caricato il meccanismo, si è proceduto con una serie di step intermedi, prima della formazione della libreria finale, di seguito vengono spiegati i vari step seguiti prima della simulazione finale per la generazione della libreria.

STEP 1:

Simulazione con condizioni iniziali esposte nella tabella seguente:

STEP 1	
Pressione	1 [bar]
Dosatura relativa	1 [-]
Temperatura	800 [K]
EGR	0%

Si può notare la scelta di condizioni iniziali particolarmente favorevoli alla combustione, di modo da facilitare la simulazione (infatti il valore di EGR è stato posto pari a zero). Tale simulazione servirà come condizione iniziale per le future simulazioni, questa simulazione risulta essere l'unica ad essere lanciata senza aver fornito le condizioni iniziali.

STEP 2-3-4:

Negli step successivi l'idea è quella di realizzare delle librerie intermedi, andando a variare soltanto un parametro fra quelli da cui dipende il fenomeno.

Quindi seguirà uno *sweep* di pressione, secondo i passi di discretizzazione riportati in Tabella 3.1: Range di variabilità dei parametri con cui sono state eseguite le simulazioni Tabella 3.1, mantenendo le altre grandezze invariate rispetto a quelle dello step 1. Inoltre per tutti questi step verranno anche fissate le condizioni iniziali, ciò renderà le simulazioni molto più accurate.

In seguito si avrà uno *sweep* di temperatura, mantenendo le altre grandezze così come riportate in Tabella 3.1. Ed infine si avrà l'ultimo *sweep* di EGR, sempre mantenendo le altre grandezze invariate.

STEP 5:

L'ultima simulazione prevede il lancio di un'unica simulazione in cui si fanno variare tutti i parametri contemporaneamente, da cui poi si otterrà la libreria finale. La libreria finale sarà una tabella avente, per ogni quaterna di pressione, temperatura, dosatura relativa ed EGR, il corrispettivo valore della LFS.

3.3 Confronto fra i meccanismi Aramco 2.0 e GRI-mech 3.0

Una volta generata la libreria, si è potuto procedere al confronto dei due meccanismi con una serie di valori sperimentali di LFS, raccolti dalla letteratura scientifica. Inoltre questa parte del lavoro può essere presa come una validazione dei dati sperimentali ottenuti mediante le simulazioni. Prima di riportare i risultati di tale confronto, è bene precisare quali siano le differenze fra i meccanismi in analisi, riassunti nella seguente tabella:

Kinetic Mechanism	GRI-Mech 3.0	Aramco 2.0
Composition	Includes CH ₄ /C ₂ H ₆ /C ₃ H ₈ Mixtures	Includes CH ₄ /C ₂ H ₆ /C ₃ H ₈ /C ₂ H ₄ / C ₂ H ₂ / C ₂ H ₅ OH/C ₃ H ₆ /CH ₃ OH Mixtures
Experimental techniques	Rapid compression machines and shock tube	Shock tubes, rapid compression machines, flames, jet-stirred and plug-flow reactors.
Chemical reactions and species	<u>325 reactions and 53 species</u>	<u>2716 reactions and 502 species</u>
Pressure range of validation	13-21 bar	1.2-260 bar
Temperature range of validation	850-925 K	1040-2584 K

Tabella 3.2: Confronto fra i meccanismi Aramco 2.0 e GRI-mech 3.0

Innanzitutto è possibile notare che, come annunciato precedentemente, i meccanismi vengono ricavati a partire dai dati sperimentali, andando a settare alcuni coefficienti delle equazioni risolte dal modello chimico, di modo da pervenire agli stessi valori di LFS ottenuti per via sperimentale. La principale differenza fra i due meccanismi di reazione è il numero di specie chimiche e reazioni con le quali viene simulato il fenomeno di combustione, in particolare Aramco 2.0 usa circa dieci volte il numero di specie e reazioni utilizzate da GRI-mech 3.0. Il motivo per cui in GRI-mech 3.0 non siano presenti molte reazioni, deriva da un'analisi della sensibilità, cioè non tutte le reazioni hanno lo stesso peso durante l'analisi del fenomeno della combustione e poiché i tempi di simulazione aumentano esponenzialmente con il numero di reazioni e specie contenute nel meccanismo, la scelta del numero di reazioni può essere anche una scelta di compromesso. Per cui ci si aspetta una maggiore precisione dal meccanismo Aramco 2.0 ma sicuramente una maggiore velocità dal meccanismo GRI-mech 3.0.

3.3.1 Validazione dei risultati con i meccanismi Aramco 2.0 e GRI-mech 3.0

In questa fase avviene la validazione, o confronto fra i dati sperimentali ed i dati ottenuti mediante simulazione, sia con meccanismo Aramco 2.0 che con meccanismo GRI-mech 3.0.

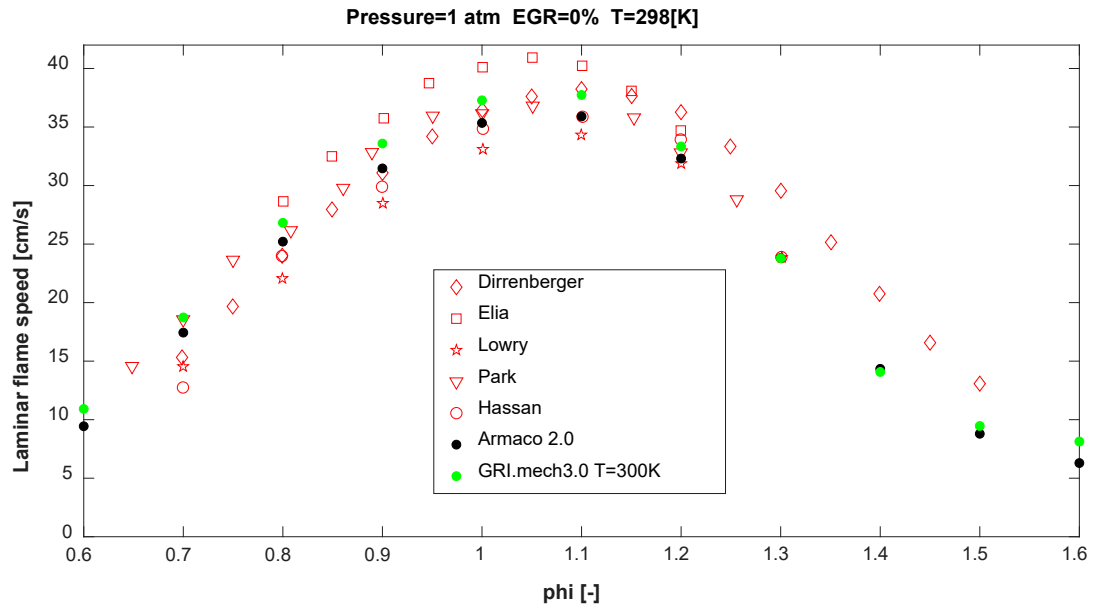


Figura 3.3: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH_4/aria a $p=1 \text{ atm}$, $\text{EGR}=0\%$ e $T=298 \text{ K}$

In Figura 3.3 si può notare come entrambi i meccanismi abbiano una buona attendibilità sia nella zona del ricco che nella zona del povero. In Figura 3.4 si può notare come, all'aumentare della pressione, il meccanismo GRI-mech 3.0 tenda a sovrastimare i valori sperimentali nella zona del ricco ed a sottostimarli nella zona del povero.

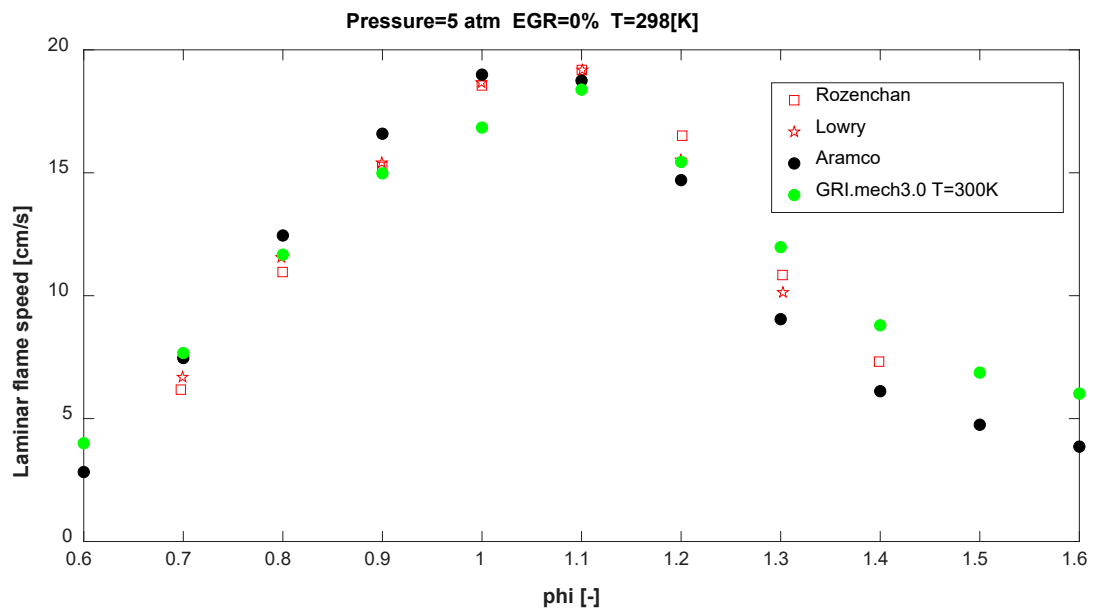


Figura 3.4: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH_4/aria a $p=5 \text{ atm}$, $\text{EGR}=0\%$ e $T=298 \text{ K}$

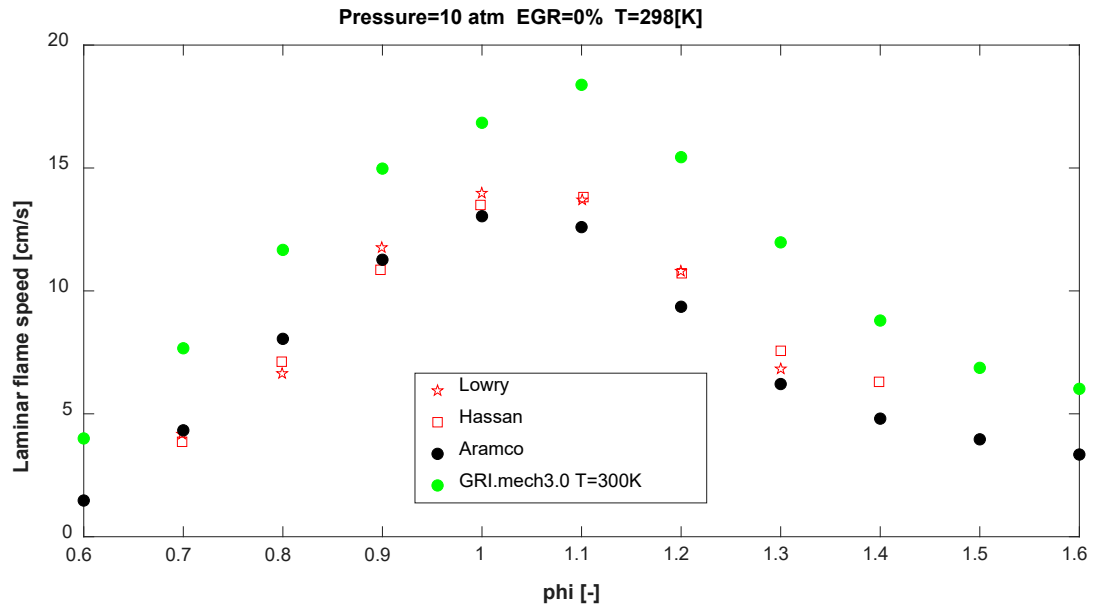


Figura 3.5: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH₄/aria a $p=10$ atm, EGR=0% e $T=298$ K

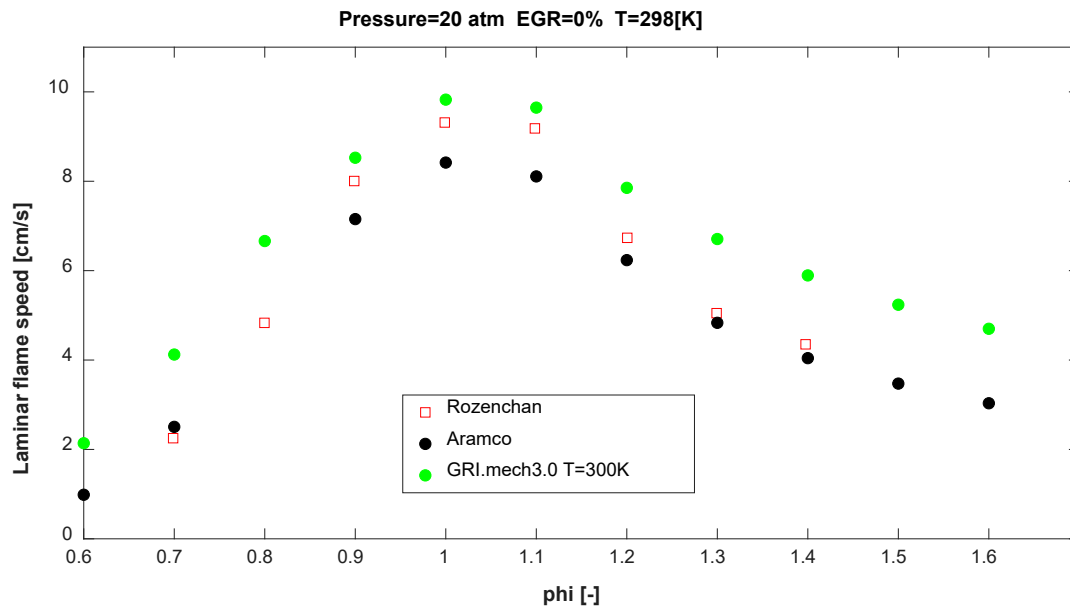


Figura 3.6: Confronto fra dati sperimentali e dati ottenuti mediante simulazione, per una miscela CH₄/aria a $p=20$ atm, EGR=0% e $T=298$ K

Dalle figure precedenti si può apprezzare la criticità del meccanismo GRI-mech 3.0 all'aumentare della pressione, esso risulta essere sicuramente più veloce del meccanismo Aramco 2.0, ma sicuramente meno preciso. Quindi concludendo è possibile affermare che:

- Per valori molto bassi di pressione (fra 1 e 4 atm), sia Aramco 2.0 che GRI-mech 3.0 sono abbastanza coerenti con i dati sperimentali raccolti;
- Per valori di pressione compresi fra 5 e 20 atm, Aramco 2.0 predice correttamente i dati sperimentali nella zona del povero ma tende a sovrastimarli nella zona del ricco. Mentre GRI-mech3.0 tende a sovrastimare sia nel ricco che nel povero man mano che la pressione aumenta.

Si può osservare inoltre, in riferimento alla Figura 3.3, che i valori di LFS calcolati mediante il meccanismo Aramco 2.0 risultano essere più vicini ai valori sperimentali ottenuti da Lowry piuttosto che quelli di Elia (oggetto del confronto nel capitolo precedente). Quindi i valori ottenuti con Aramco 2.0 risultano essere più

vicini ai valori sperimentali ritenuti più affidabili, ulteriore conferma della maggiore accuratezza di tale meccanismo.

4 GASON correlation

Un altro importante obiettivo di tale lavoro di tesi è stato quello di individuare una correlazione che permettesse, dati in input i valori di dosatura, EGR, pressione e temperatura, di calcolare la LFS. Tale obiettivo risulta essere particolarmente ambizioso dal momento che il problema in considerazione dipende da quattro grandezze indipendenti. Si è deciso inoltre di sfruttare i dati della libreria generata precedentemente, dopo una fase di validazione dei risultati ottenuti con i dati sperimentali raccolti. In particolare si è deciso di lavorare con i dati generati con il meccanismo Aramco 2.0 in quanto, in seguito ad uno studio e confronto con i dati sperimentali, risulta essere quello più accurato, soprattutto per valori medio-alti di pressione.

Prima di procedere con l'individuazione della correlazione, si è deciso di studiare lo stato dell'arte delle correlazioni presenti in letteratura, le quali risultano essere piuttosto numerose, in quanto potenzialmente sono molto importanti. Infatti l'utilizzo di una correlazione su un programma di simulazione termofluidodinamica, andrebbe a ridurre notevolmente i costi computazionali del programma stesso, velocizzando le simulazioni, anziché risolvere la cinetica chimica o interpolare la LFS mediante l'utilizzo di look-up table.

4.1 Stato dell'arte delle correlazioni

Una delle correlazioni empiriche, quindi ricavata interamente mediante interpolazione dei dati sperimentali a disposizione, è la *power law formula*:

$$S_L(\phi, T_u, p_u) = S_{L,0} \left(\frac{T_u}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{p_u}{p_0} \right)^\beta \quad (4.1)$$

Dove $S_{L,0}$ è il valore della LFS valutato alle condizioni di riferimento $T_u = T_0$ e $p_u = p_0$ per un dato valore del rapporto di equivalenza ϕ , mentre α e β sono delle costanti. Uno dei contributi più importanti nel campo delle correlazioni per il calcolo della LFS, è sicuramente quello di Metghalchi and Keck. La loro correlazione è stata ricavata mediante interpolazione dei dati sperimentali ottenuti mediante la misurazione della LFS in una bomba sferica, adottando il metodo Constant Volume. Dopo aver interpolato i dati sperimentali con la power law formula, per diverse tipologie di combustibili, ci si rese conto che gli esponenti α e β sono indipendenti dalla tipologia di combustibile, ma dipendono principalmente dalla dosatura della miscela. Infatti in Figura 4.1 si può notare che i valori di α e β per metanolo, propano, isottano e RMFD 303, risultano essere molto simili fra di loro, al variare della dosatura, pur trattandosi di combustibili notevolmente differenti.

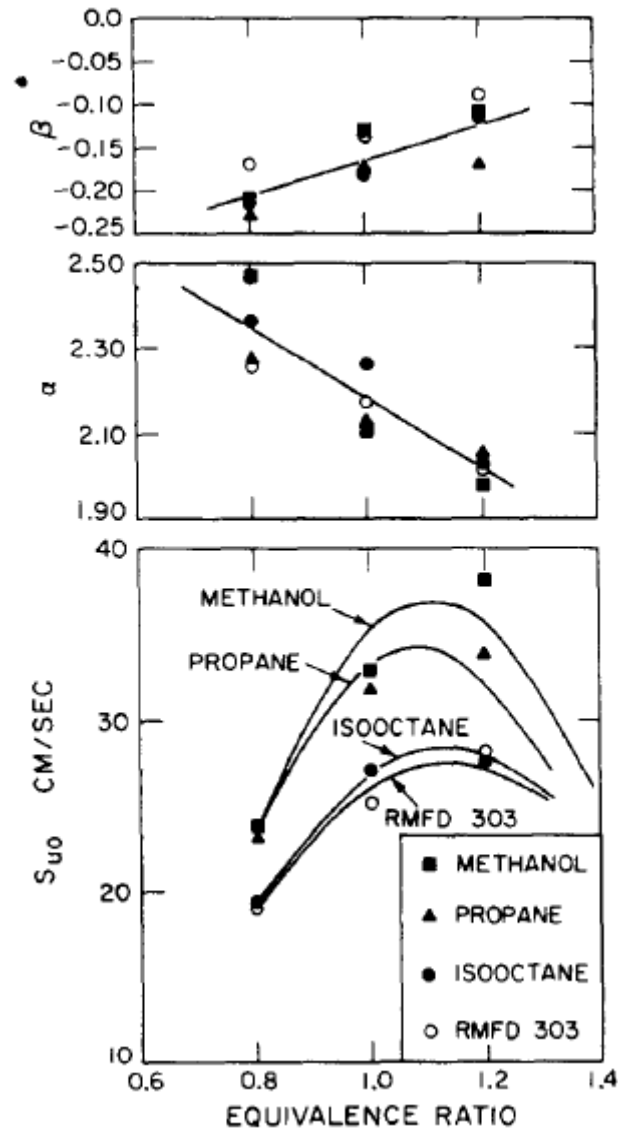


Figura 4.1: Risultati ottenuti da Metghalchi e Keck. Andamento dei coefficienti α e β al variare della dosatura relativa per diverse tipologie di combustibile.

In particolare Metghalchi et al. suggeriscono una relazione lineare per entrambi i coefficienti α e β :

$$\alpha = 2.18 - 0.8(\phi - 1) \quad (4.2)$$

$$\beta = -0.16 + 0.22(\phi - 1) \quad (4.3)$$

Mentre per quanto riguarda il valore della *reference velocity*, essa dipende dalla tipologia di combustibile e dalla dosatura relativa mediante una relazione polinomiale del secondo ordine:

$$S_{L,0}(\phi) = B_m + B_2(\phi - \phi_m)^2 \quad (4.4)$$

Dove i valori di B_m , B_2 e ϕ_m sono tabellati nella tabella seguente per alcune tipologie di combustibile:

Combustibile	ϕ_m	B_m [cm/s]	B_2 [cm/s]
Metanolo	1.11	36.92	-140.51
Propano	1.08	34.22	-138.65
Isoottano	1.13	26.32	-84.72

Tabella 4.1: Coefficienti ottenuti da Metghalchi et al. per diverse tipologie di combustibili

Si può osservare che il valore di ϕ_m corrisponde all'ascissa del vertice della parabola, cioè il punto in cui la LFS risulta essere massima, e si può osservare come tutti i valori cadano nel leggermente ricco, come già accennato nei capitoli precedenti. Uno degli inconvenienti principali di tale correlazione riguarda il fatto che

per valori di dosatura inferiori a 0.6 e superiori a 1.6 (pari alle radici dell'equazione (4.4), nel caso del metanolo pari rispettivamente a 0.597 e 1.622), i valori della LFS diventano negativi e quindi fisicamente impossibili. Questo inconveniente restringe il range di utilizzo di tale correlazione, andando ad escludere possibili applicazioni in motori a combustione interna a carica stratificata, in cui la dosatura in camera può discostarsi anche notevolmente da quella stechiometrica.

Una formulazione differente dell'equazione (4.4) è stata proposta da Elia et al. per quanto riguarda la velocità di riferimento ed il valore delle costanti α e β , nel caso del metano:

$$S_{L,0} = S_{u,0}(\alpha_0 + \alpha_1\phi + \alpha_2\phi^2) \quad (4.5)$$

Dove:

- $S_{u,0} = 37.5 \text{ cm/s}$;
- $\alpha_0 = -5.883$;
- $\alpha_1 = 14.003$;
- $\alpha_2 = -7.115$;
- $\alpha = 1.857$;
- $\beta = -0.435$.

Anche in questo caso, trattandosi di un andamento parabolico, il range di variabilità per la dosatura risulta essere ristretto da 0.8 a 1.2. L'inconveniente principale di tale correlazione risulta essere il fatto di non disporre di una correlazione per i coefficienti α e β , i quali sicuramente variano al variare della dosatura e non è detto che non dipendano anche da temperatura e pressione.

Gu et al. suggeriranno invece tre espressioni per l'equazione principale (4.1), andando ad ottimizzare i valori di $S_{u,0}$, α e β per tre valori di dosatura relativa ($\phi = 0.8, 1$ e 1.2) per temperature da 300 a 400 K e pressioni da 1 a 10 atm.

Altri ricercatori hanno lavorato invece su correlazioni valide solo per miscele stechiometriche, quindi andando a ridurre il numero di variabili in gioco, fra queste è possibile citare la correlazione di Han et al., valida per una miscela stechiometrica di metano/aria:

$$S_L = 36.11 \left(\frac{T_u}{T_0}\right)^\alpha \left(\frac{p_u}{p_0}\right)^{-0.37} \quad (4.6)$$

Con $T_0 = 300 \text{ K}$ e $p_0 = 1 \text{ atm}$ e l'esponente α definito dalla seguente correlazione:

$$\alpha(p_u) = 1.5365 + 0.1165 p_u \quad (4.7)$$

È possibile notare come il parametro α non dipenda soltanto dalla dosatura, in maniera lineare come esposto precedentemente, ma anche dalla pressione iniziale della miscela.

Un'altra correlazione, valida soltanto per miscela stechiometrica, risulta essere quella di Hu et al., i quali individueranno due nuove correlazioni per i coefficienti α e β , sempre per una miscela stechiometrica metano/aria:

$$\alpha(T_u) = 1.39 + 0.0006 T_u, \quad 300 \text{ K} \leq T_u \leq 700 \text{ K} \quad (4.8)$$

$$\beta(p_u) = 0.266e^{-\frac{p_u}{0.841}} - 0.511, \quad 1 \text{ atm} \leq p_u \leq 60 \text{ atm} \quad (4.9)$$

In questo caso si nota un'altra dipendenza di α , il quale dipende anche dalla temperatura iniziale della miscela, oltre che dalla pressione e dosatura relativa.

Un approccio completamente nuovo sarà quello utilizzato da Gulder per la determinazione della velocità di riferimento:

$$S_{L,0} = ZW\phi^\eta e^{-\xi(\phi-\sigma)^2} \quad (4.10)$$

Dove i valori di W , η e ξ sono costanti per un dato combustibile, mentre Z è pari ad 1 nel caso di combustibili costituiti da un solo tipo di idrocarburo. Grazie a questa formulazione della velocità di riferimento si riesce a seguire l'andamento quasi-Gaussiano della LFS al variare della dosatura, cosa che non era possibile con un andamento parabolico; in questo modo è possibile estendere il range di utilizzo della correlazione. Gulder però suggerisce dei valori costanti per i coefficienti α e β , pari rispettivamente a 2 e -0.5 per una miscela metano/aria.

Altri ricercatori come Dirrenberger et al. e Coppens et al. hanno lavorato sulla stessa correlazione proposta da Gulder, ottenendo risultati fra di loro coerenti ma in contrasto con quelli ottenuti da Gulder (Tabella 4.2).

Autori	Combustibile	Z	W (cm/s)	η	ξ	σ
Gulder	CH ₄	1	42.2	0.15	5.18	1.075
Dirrenberger et al.	CH ₄	1	38.638	-0.15	6.2706	1.1
Coppens et al.	CH ₄	1	39.0542	-0.4333	6.0157	1.1

Tabella 4.2: Confronto fra i coefficienti ottenuti da diversi autori in merito alla correlazione in equazione (4.10)

In ultima analisi *Liao et al.* suggeriscono l'utilizzo di un polinomio di terzo grado per la determinazione della LFS alle condizioni di riferimento:

$$S_{L,0} = -177.43\phi^3 + 340.77\phi^2 - 123.66\phi - 0.2297 \quad (4.11)$$

Mentre per i coefficienti α e β suggeriscono una relazione polinomiale del secondo ordine:

$$\alpha(\phi) = 5.75\phi^2 - 12.15\phi + 7.98 \quad (4.12)$$

$$\beta(\phi) = -0.905\phi^2 + 2\phi - 1.473 \quad (4.13)$$

Riassumendo quindi, per quanto riguarda i coefficienti α e β si sono incontrate tre soluzioni differenti, rappresentate nelle Figure (4.2-4.3).

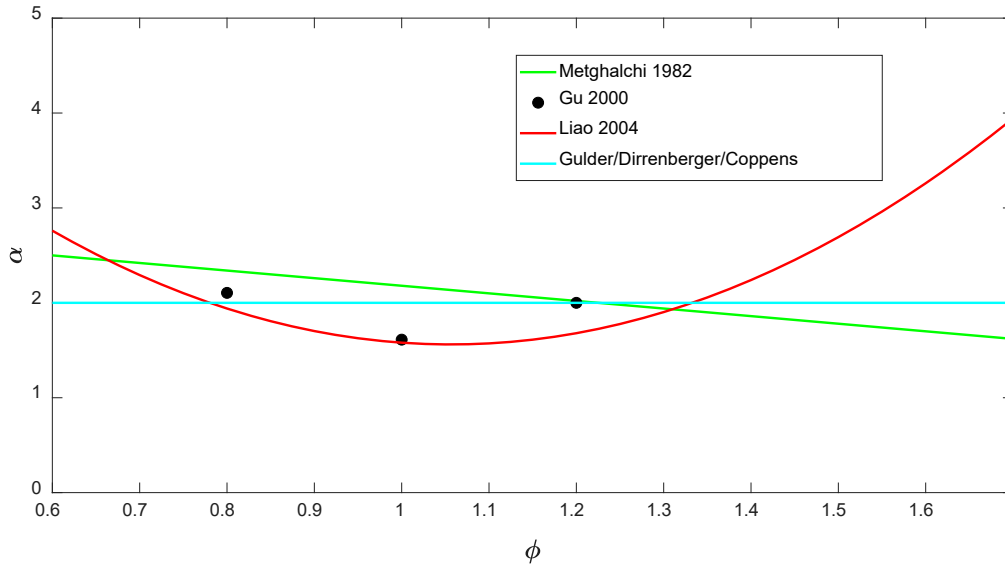


Figura 4.2: Confronto fra differenti correlazioni per α al variare di ϕ

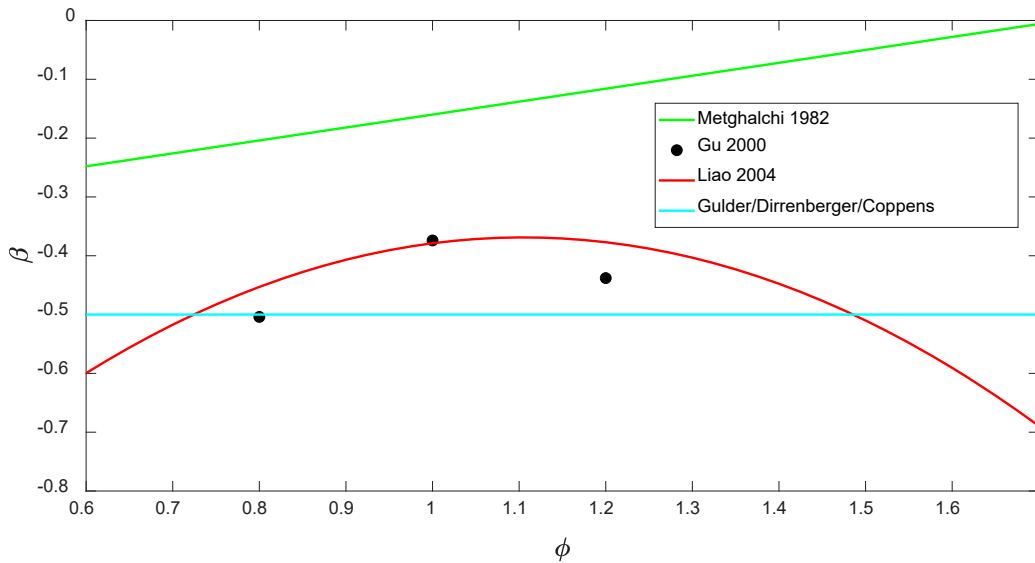


Figura 4.3: Confronto fra differenti correlazioni per β al variare di ϕ

È possibile notare che la soluzione migliore, per approssimare l'andamento di α e β risulta essere quella individuata da Liao et al., di tipo parabolico. La piccola differenza fra i risultati di Gu et al. e quelli di Liao et al. risiede nella diversa tipologia di combustibili analizzati, in particolare Liao ha lavorato con gas naturale con percentuali di metano vicine al 96 %, a differenza del puro metano analizzato da Gu et al.

Nella tabella seguente sono state riassunte alcune informazioni delle correlazioni esposte in questo paragrafo.

Autori	Correlazione per CH ₄ /aria	Range raccomandato di utilizzo della correlazione																
Metghalchi et al.	$\alpha(\phi) = 2.18 - 0.8(\phi - 1)$ $\beta(\phi) = -0.16 + 0.22(\phi - 1)$ $S_{L0}(\phi) = B_m + B_2(\phi - \phi_m)^2$ $T_0 = 298\text{ K}; p_0 = 1\text{ atm}$	$p_u = 1 - 50\text{ atm}$ $T_u = 350\text{ K} - 750\text{ K}$ Valori negativi di LFS per $\phi < 0.6$ e $\phi > 1.6$																
Elia et al.	$S_{L0}(\phi) = S_{UO}(\alpha_0 + \alpha_1\phi + \alpha_2\phi^2)$ $S_{u0} = 37.5\text{ cm/s}$ $\alpha_0 = -5.883$ $\alpha_1 = 14.003$ $\alpha_2 = -7.115$ $\alpha = 1.857$ $\beta = -0.435$ $T_0 = 298\text{ K}; p_0 = 1\text{ atm}$	Valori negativi di LFS per $\phi < 0.6$ and $\phi > 1.6$																
Gu et al.	Tre espressioni per l'equazione (4.1), ottimizzata per tre valori di dosatura relativa: <table><tr><td>ϕ</td><td>S_{u0} (cm/s)</td><td>α</td><td>β</td></tr><tr><td>0.8</td><td>25.9</td><td>2.105</td><td>-0.504</td></tr><tr><td>1.0</td><td>36.0</td><td>1.612</td><td>-0.374</td></tr><tr><td>1.2</td><td>31.4</td><td>2.000</td><td>-0.438</td></tr></table> $T_0 = 300\text{ K}; p_0 = 1\text{ atm}$	ϕ	S_{u0} (cm/s)	α	β	0.8	25.9	2.105	-0.504	1.0	36.0	1.612	-0.374	1.2	31.4	2.000	-0.438	$p_u = 1 - 10\text{ atm}$ $T_u = 300 - 400\text{ K}$ $\phi = 0.8; 1; 1.2$
ϕ	S_{u0} (cm/s)	α	β															
0.8	25.9	2.105	-0.504															
1.0	36.0	1.612	-0.374															
1.2	31.4	2.000	-0.438															
Han et al.	$S_L = 36.11 \left(\frac{T_u}{T_0}\right)^\alpha \left(\frac{p_u}{p_0}\right)^{-0.37}$ $\alpha(p_u) = 1.5365 + 0.1165p_u$ $T_0 = 300\text{ K}; p_0 = 1\text{ atm}$	$p_u = 1 - 5\text{ atm}$ $T_u = 298 - 498\text{ K}$ $\phi = 1$																
Hu et al.	$\alpha(T_u) = 1.39 + 0.0006T_u,$ $300\text{ K} \leq T_u \leq 700\text{ K}$ $\beta(p_u) = 0.226e^{\frac{p_u}{-0.841}} - 0.511,$ $1\text{ atm} \leq p_u \leq 60\text{ atm}$ $T_0 = 300\text{ K}; p_0 = 1\text{ atm}$	$p_u = 1 - 60\text{ atm}$ $T_u = 300 - 700\text{ K}$ $\phi = 1$																
Liao et al.	$S_{L,0} = -177.43\phi^3 + 340.77\phi^2 - 123.66\phi - 0.2297$ $\alpha(\phi) = 5.75\phi^2 - 12.15\phi + 7.98$	-																

	$\beta(\phi) = -0.905\phi^2 + 2\phi - 1.473$ $T_0 = 298\text{ K}; p_0 = 1\text{ atm}$												
Gulder et al.	$S_{L0} = ZW\phi^\eta e^{-\xi(\phi-\sigma)^2}$ $Z = 1(\text{per single-constituent fuel})$ $\alpha = 2; \beta = -0.5$ <table><tr><td>W [cm/s]</td><td>η</td><td>ξ</td><td>σ</td></tr><tr><td>42.2</td><td>0.15</td><td>5.18</td><td>1.075</td></tr></table>				W [cm/s]	η	ξ	σ	42.2	0.15	5.18	1.075	-
W [cm/s]	η	ξ	σ										
42.2	0.15	5.18	1.075										
Dirrenberger et al.	$S_{L0} = ZW\phi^\eta e^{-\xi(\phi-\sigma)^2}$ $Z = 1(\text{per single-constituent fuel})$ $\alpha = 2; \beta = -0.5$ <table><tr><td>W [cm/s]</td><td>η</td><td>ξ</td><td>σ</td></tr><tr><td>38.638</td><td>-0.15</td><td>6.2706</td><td>1.1</td></tr></table>				W [cm/s]	η	ξ	σ	38.638	-0.15	6.2706	1.1	-
W [cm/s]	η	ξ	σ										
38.638	-0.15	6.2706	1.1										
Coppens et al.	$S_{L0} = ZW\phi^\eta e^{-\xi(\phi-\sigma)^2}$ $Z = 1(\text{per single-constituent fuel})$ $\alpha = 2; \beta = -0.5$ <table><tr><td>W [cm/s]</td><td>η</td><td>ξ</td><td>σ</td></tr><tr><td>39.0542</td><td>-0.4333</td><td>6.0157</td><td>1.1</td></tr></table>				W [cm/s]	η	ξ	σ	39.0542	-0.4333	6.0157	1.1	-
W [cm/s]	η	ξ	σ										
39.0542	-0.4333	6.0157	1.1										

Tabella 4.3: Tabella riassuntiva delle principali correlazioni presenti in letteratura

4.2 Curve fitting cenni

Per ricavare la correlazione a partire dalla libreria generata precedentemente, con meccanismo Aramco 2.0, si è deciso di utilizzare il toolbox Curve Fitting di MATLAB®. Grazie a questo toolbox è possibile andare ad interpolare dati non solo utilizzando funzioni polinomiali (e quindi lineari), ma anche funzioni di tipo esponenziale, gaussiano, razionali (in generale non lineari) possono essere utilizzate.

Alla base di tale programma c'è il metodo ai minimi quadrati, tale algoritmo permette di individuare i coefficienti incogniti della generica correlazione, andando a minimizzare la somma dei quadrati della distanza fra i dati che si vogliono predire, ed il valore predetto dalla correlazione. Quindi, in formule, si avrà che il residuo risulta essere pari a:

$$r_i = y_i - \hat{y}_i \quad (4.1)$$

Dove con y_i si indica il valore da predire e con $\hat{y}_i$ si indica il valore predetto dalla correlazione, mentre r_i prende il nome di residuo. La funzione che si andrebbe a minimizzare risulta essere la seguente:

$$S = \sum_{i=1}^n r_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.2)$$

Dove n rappresenta il numero di punti che si hanno a disposizione o *training points*. Da un punto di vista più intuitivo si può immaginare che tale metodo vada a minimizzare l'energia potenziale elastica. Infatti supponendo di fissare una molla ad ogni punto (x_i, y_i) che si ha a disposizione, e di fissare l'altro estremo della molla alla generica funzione; tale metodo andrà a "deformare" la funzione, fino a quando non si avrà la configurazione di minima energia potenziale elastica del sistema di molle. Su tale toolbox sono implementati diversi metodi dei minimi quadrati, in particolare:

- Linear least squares;
- Nonlinear least squares;
- Robust least squares;
- Weighted linear least squares.

4.2.1 Linear least squares

Tale metodo viene utilizzato dal toolbox per interpolare dati con funzioni di tipo lineare, cioè funzioni che sono lineari nei coefficienti, ad esempio funzioni polinomiali. Tale metodo risulta essere il più semplice fra quelli esposti ma allo stesso tempo il più importante per comprendere il metodo dei minimi quadrati. Supponendo, infatti, di avere a disposizione una nuvola di n punti, aventi un andamento di tipo polinomiale di primo ordine, si può procedere con l'interpolazione dei dati mediante la seguente correlazione:

$$y = p_1x + p_2 \quad (4.3)$$

Quindi l'obiettivo sarà quello di individuare i coefficienti p_1 e p_2 . Il termine che si vuole minimizzare risulta essere:

$$S = \sum_{i=1}^n (y_i - (p_1x_i + p_2))^2 \quad (4.4)$$

Siccome si vuole trovare il minimo di tale funzione, si procederà con il calcolo delle derivate parziali, rispetto ai coefficienti incogniti, ponendo quest'ultime paria a zero:

$$\frac{\partial S}{\partial p_1} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - (p_1x_i + p_2)) = 0 \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial S}{\partial p_2} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - (p_1x_i + p_2)) = 0 \quad (4.6)$$

Indicando con b_1 e b_2 la stima dei parametri p_1 e p_2 mediante il metodo dei minimi quadrati, si ottengono le seguenti relazioni:

$$\sum_{i=1}^n x_i (y_i - (b_1x_i + b_2)) = 0 \quad (4.7)$$

$$\sum_{i=1}^n (y_i - (b_1x_i + b_2)) = 0 \quad (4.8)$$

Le equazioni (4.7-4.8) costituiscono il **sistema di equazioni normali di regressione**, risolvendo tale sistema si ottiene:

$$b_1 \sum x_i^2 + b_2 \sum x_i = \sum x_i y_i \quad (4.9)$$

$$b_1 \sum x_i + nb_2 = \sum y_i \quad (4.10)$$

Le equazioni precedenti, la (4.9) e la (4.10) prendono il nome di *equazioni normali*.

In definitiva il valore delle incognite sarà dato da:

$$b_1 = \frac{(n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i)}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad (4.11)$$

$$b_2 = \frac{1}{n} \left(\sum y_i - b_1 \sum x_i \right) \quad (4.12)$$

Grazie alle relazioni (4.11-4.12) si è in grado di individuare la retta che meglio approssima la nuvola di punti (x_i, y_i) .

Estendendo quanto appena visto per una generica funzione lineare, con una notazione matriciale, si avrà che:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \quad (4.13)$$

Dove:

- $\mathbf{y}$ è un vettore colonna di tipo $n \times 1$ (*responses*);
- $\boldsymbol{\beta}$ è una matrice dei coefficienti di dimensioni $m \times 1$;
- $\mathbf{X}$ è una matrice di tipo $n \times m$;
- $\boldsymbol{\epsilon}$ è il vettore degli errori di tipo $n \times 1$.

Nel caso del polinomio del primo ordine esaminato precedentemente si avrà che:

$$\begin{aligned}
y_1 &= p_1 x_1 + p_2 \cdot 1 \\
y_2 &= p_1 x_2 + p_2 \cdot 1 \\
&\vdots \\
y_n &= p_1 x_n + p_2 \cdot 1
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Ed in forma matriciale sarà:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ x_3 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_n & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} \tag{4.15}$$

La soluzione del metodo dei minimi quadrati sarà il vettore $\mathbf{b}$, che andrà a stimare il valore delle incognite contenute nella matrice β . La funzione che si intende minimizzare risulta essere:

$$J(\mathbf{b}) = (\mathbf{y} - X\mathbf{b})^T (\mathbf{y} - X\mathbf{b}) \tag{4.16}$$

Ora, ricordando due proprietà delle matrici, in particolare data la matrice A non dipendente da θ , si avrà che:

$$\frac{\partial A\theta}{\partial \theta} = A^T \tag{4.17}$$

$$\frac{\partial (\theta^T A \theta)}{\partial \theta} = 2A^T \theta \tag{4.18}$$

Quindi, sviluppando il prodotto in equazione (4.16) si ottiene, tramite semplici passaggi la seguente funzione di costo, che si vuole minimizzare:

$$J(\mathbf{b}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} + \mathbf{b}^T X^T X \mathbf{b} - 2\mathbf{y}^T X \mathbf{b} \tag{4.19}$$

Tale funzione prende il nome di funzione di costo (o *cost function*). Nel caso in cui la funzione obiettivo sia un polinomio di primo grado, tale funzione è rappresentata da un paraboloide, del quale si vuole conoscere il minimo. In Figura 4.4 è possibile notare il paraboloide nel caso in cui il vettore $\mathbf{b}$ contenga due soli coefficienti. L'obiettivo sarà quello di determinare il vertice della parabola, che andrebbe a minimizzare la cost function.

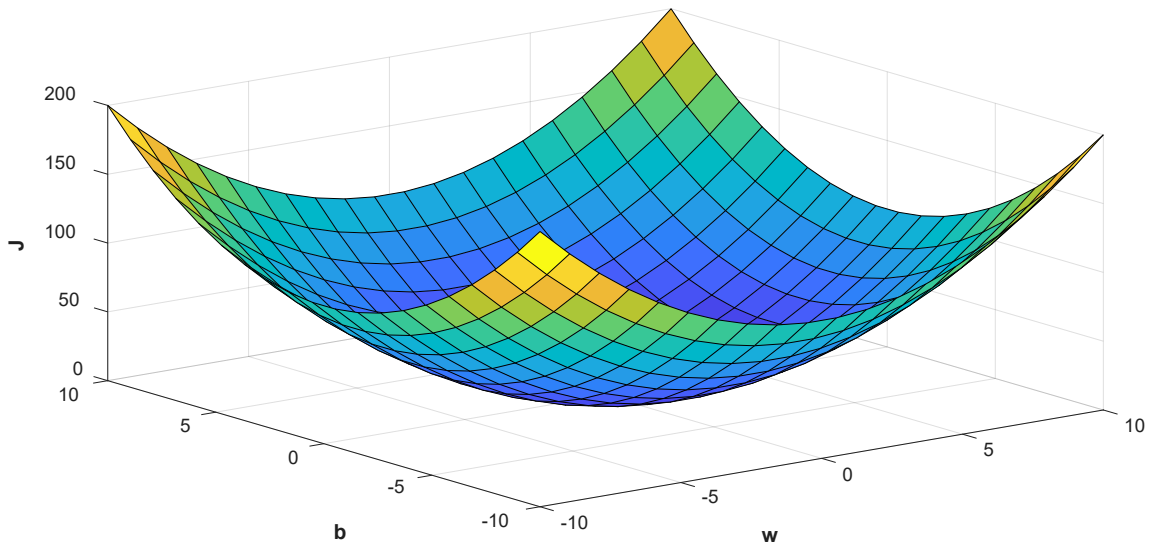


Figura 4.4: Rappresentazione grafica della funzione di costo J nel caso di funzione interpolante di tipo $y=w+bx$

Andando a derivare la (4.19) rispetto al vettore dei coefficienti $\mathbf{b}$, si ottiene:

$$\frac{\partial J(\mathbf{b})}{\partial \mathbf{b}} = 0 + 2X^T X \mathbf{b} - 2X^T \mathbf{y} \tag{4.20}$$

Ponendo la (4.20) pari a zero, volendo determinare il minimo di tale funzione, si ottiene:

$$X^T X \mathbf{b} = X^T \mathbf{y} \tag{4.21}$$

La (4.21) rappresenta l'equazione normale (4.9-4.10) scritta però in forma matriciale. In definitiva è possibile calcolare il valore del vettore incognito $\mathbf{b}$, con la seguente espressione:

$$\mathbf{b} = (X^T X)^{-1} X^T \mathbf{y} \quad (4.22)$$

Su MATLAB è possibile utilizzare l'operatore “\” per la risoluzione dell'equazione (4.22) anziché procedere con il calcolo della matrice inversa, in quanto porterebbe ad inaccettabile errore sul valore finale dovuto agli arrotondamenti durante la procedura per il calcolo della matrice inversa. Quindi in definitiva, è possibile pervenire all'ultima relazione:

$$\hat{\mathbf{y}} = X\mathbf{b} = \underbrace{X(X^T X)^{-1} X^T}_{\text{hat-matrix}} \mathbf{y} \quad (4.23)$$

Dove con $\hat{\mathbf{y}}$ si indica il valore stimato (o predetto dalla correlazione individuata con il metodo dei minimi quadrati), mentre $\mathbf{y}$ si indica il vettore dei responsi. La matrice $X(X^T X)^{-1} X^T$ prende il nome di “hat-matrix”, H , perché mette un cappello (*hat*) sul vettore $\mathbf{y}$:

$$\hat{\mathbf{y}} = H\mathbf{y} \quad (4.24)$$

4.2.2 Weighted linear least squares

Nel metodo precedente, si è supposto che tutti i punti abbiano la stessa importanza, cioè lo stesso “peso”, per tutti pari ad uno. Nel caso in cui si voglia assegnare un'importanza maggiore ad alcuni punti, di modo che la correlazione finale approssimi meglio tali punti, si può ricorrere a tale tipologia di metodo. La funzione che si andrà a minimizzare in tal caso sarà:

$$S = \sum_{i=1}^n w_i (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.25)$$

Dove con il termine w_i si intende il peso associato all' i -esimo dato. La (4.22) si modificherà in questo caso per tenere conto dei pesi:

$$\mathbf{b} = (X^T W X)^{-1} X^T W \mathbf{y} \quad (4.26)$$

Dove W è una matrice diagonale contenenti i pesi per ogni elemento i -esimo.

4.2.3 Robust Least Squares

Uno degli inconvenienti principali del metodo dei minimi quadrati è rappresentato dal peso che hanno gli *outliers* sul calcolo dei coefficienti finali. Infatti tali punti avranno una notevole importanza, in quanto, per definizione, sono dei punti che si discostano molto dal trend della nuvola di punti che si ha in input. Una soluzione, offerta dal toolbox riguarda la scelta fra due differenti schemi di regressione:

- LAR (last absolute residuals): con tale schema si va a minimizzare il valore assoluto dei residui e non il quadrato dei residui, in questo modo gli outliers avranno un peso inferiore sul trend finale della correlazione;
- Bisquare weights: tale metodo va a minimizzare una somma pesata dei quadrati dei residui, dove il peso dipende da quanto lontani sono i punti dalla curva interpolante, i punti più vicini alla curva interpolante avranno peso massimo, mentre gli outliers avranno peso minimo.

4.2.4 Nonlinear Least Squares

Il toolbox curve fitting permette di interpolare i dati anche mediante l'utilizzo di funzioni non lineari, come la Gaussiana, rapporto fra polinomi, funzioni esponenziali, sono tutti esempi di funzioni non lineari. In tal caso, volendo utilizzare la notazione matriciale si scriverà:

$$\mathbf{y} = f(X, \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\epsilon} \quad (4.27)$$

La novità consiste nell'introduzione di una funzione che dipende da X e $\boldsymbol{\beta}$, non potendo ricondurre il problema ad una forma lineare e quindi matriciale. Tali modelli risultano essere più difficili da risolvere, per essi è necessario l'utilizzo di un metodo iterativo per la risoluzione di sistemi non-lineari. In generale gli step risultano essere i seguenti:

- Fornire uno *start vector* per i coefficienti del modello non-lineare scelto;
- Produrre la curva interpolante nonlineare, mediante l'utilizzo dei coefficienti forniti al punto (1)
- Tramite un algoritmo di *discesa*, aggiornare i valori dei coefficienti, di modo da minimizzare la funzione obiettivo J , il toolbox fornisce due algoritmi per i sistemi non lineari:
 - Trust-region (algoritmo di default);
 - Levenberg-Marquardt
- re-iterazione degli step 2-3 fino a quando non soddisfatti dei prestabiliti criteri di convergenza.

4.2.5 Goodness of Fit Statistics

In seguito all'interpolazione dei dati, per valutare quanto l'interpolazione sia precisa o per confrontare quale fra due modelli predice meglio i dati che si hanno a disposizione, il toolbox fornisce in output i seguenti parametri:

- **SSE** (Sum of Squares Errors): tale parametro rappresenta la somma dei quadrati dei residui, pertanto è esprimibile con la seguente relazione:

$$SSE = \sum_{i=1}^n w_i (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.28)$$

Dove con y_i si indica il *response value*, mentre con $\hat{y}_i$ si indica il valore predetto dal modello.

Quanto più tale coefficiente risulta essere vicino allo zero, tanto più il modello scelto risulta essere attendibile.

- **R-square**: esso è definito dalla seguente relazione:

$$R - square = \frac{SSR}{SST} = \frac{\sum_{i=1}^n w_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n w_i (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n w_i (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n w_i (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (4.29)$$

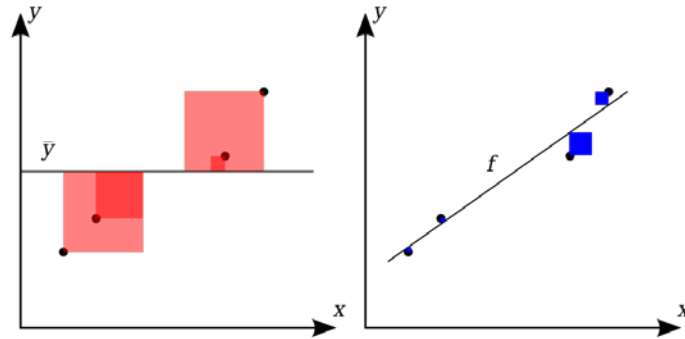


Figura 4.5: Descrizione grafica della definizione del coefficiente R-square, in rosso *SST*, in blu *SSE*

In Figura 4.5 è raffigurata una spiegazione grafica dei parametri che permettono il calcolo del coefficiente R-square, in cui la somma dei riquadri rossi rappresenta il coefficiente SST, mentre in blu è rappresentato il coefficiente SSE. Per comprendere il motivo dei passaggi nell'equazione (4.2), bisogna ricordare alcune proprietà dei residui, infatti è possibile scrivere che:

$$y_i - \bar{y} = (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}) \quad (4.30)$$

Dove $\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$.

Elevando al quadrato entrambi i membri e sommando su tutti gli N dati a disposizione si ottiene:

$$\sum (y_i - \bar{y})^2 = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + 2 \underbrace{\sum (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y})}_{=0} \quad (4.31)$$

Dove:

- $\sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2$ rappresenta il coefficiente SSR (*explained sum of squares*);
- $\sum (y_i - \bar{y})^2$ rappresenta il coefficiente SST (*total sum of squares*);
- $\sum (y_i - \hat{y}_i)^2$ rappresenta il coefficiente SSE (*residual sum of squares*).

Per quanto riguarda l'ultimo termine in equazione (4.31), esso risulta essere nullo, perché alla base del metodo dei minimi quadrati, come risulta dall'equazione normale di regressione (4.8).

Quindi, è possibile concludere, dalla (4.31) che:

$$SST = SSE + SSR \quad (4.32)$$

E quindi:

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (4.33)$$

Come è possibile dedurre dalla Figura 4.5, quando il coefficiente SSE risulta essere nullo, si avrà che tutti i punti giacciono sulla curva ottenuta mediante regressione ai minimi quadrati, e quindi il coefficiente R^2 risulta essere pari ad uno.

- **Adjusted R-Square:** tale parametro risulta essere una correzione del precedente, esso è definito nel seguente modo:

$$\text{adjusted } R - \text{square} = 1 - \frac{SSE(n-1)}{SST(v)} \quad (4.34)$$

Dove $v = n - m$, con n si indica il numero di *response values* e con m il numero di coefficienti contenuti nel modello scelto. Anche per tale coefficiente, il valore ideale sarebbe quello dell'unità.

- **Root Mean Squared Error:** l'ultimo parametro che fornisce il toolbox, per valutare la bontà del modello scelto, è definito dalla seguente relazione:

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{SSE}{v}} \quad (4.35)$$

Quanto più tale parametro è prossimo allo zero tanto più il modello scelto per l'interpolazione risulta essere attendibile.

4.3 “GASON” correlation

Sfruttando la libreria generata precedentemente di LFS con LOGE research, si è deciso di seguire i seguenti step per estrarre una correlazione da tali dati. È importante sottolineare che tale correlazione sia una correlazione valida sono per miscele stechiometriche di metano/aria, ma per diversi valori di temperatura, pressione ed EGR.

STEP 1:

Il primo step prevede la scelta di una correlazione che interpoli correttamente l'andamento della LFS al variare della temperatura. Si è optato per una relazione di tipo esponenziale di tipo:

$$S_L \left[\frac{cm}{s} \right] = a \cdot e^{\frac{b(T[K]-300)}{300}} + c \quad (4.36)$$

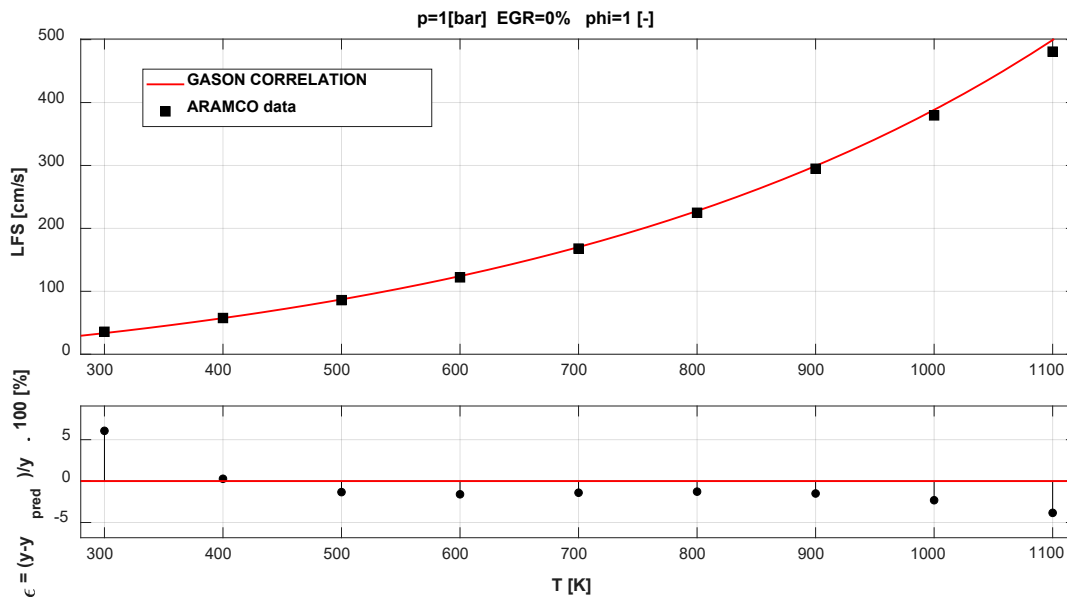


Figura 4.6: Rappresentazione della main-function nel caso di miscela stechiometrica di CH_4 /aria, a $p=1$ atm, $EGR=0$ al variare della T_i

L'equazione (4.28) risulta essere la correlazione principale o *main correlation*, si è scelto un andamento esponenziale perché, come visto nei capitoli precedenti, la velocità con cui avvengono le reazioni, e quindi con cui procede il fronte, dipende in maniera esponenziale dalla temperatura, secondo la legge di Arrhenius. Inoltre si è deciso di normalizzare la temperatura, in quanto in questo modo i metodi iterativi (in particolare si è scelto il metodo trust-region, trattandosi di un'equazione non lineare) risultano essere più stabili.

STEP 2:

Una volta scelta la funzione principale, si è deciso di creare una matrice dei coefficienti, fissato il valore di EGR pari a 0. Tale matrice contiene il valore dei tre coefficienti a , b e c per diversi valori di pressione.

Matrice dei coefficienti EGR=0%			
	a	b	c
p=1 bar	102.45	0.631	-68.73
p=2 bar	79.541	0.6781	-53.15
...	...	...	...
p=200 bar	6.6993	0.9581	-3.9566

Tabella 4.4: Esempio di matrice dei coefficienti nel caso di EGR=0%

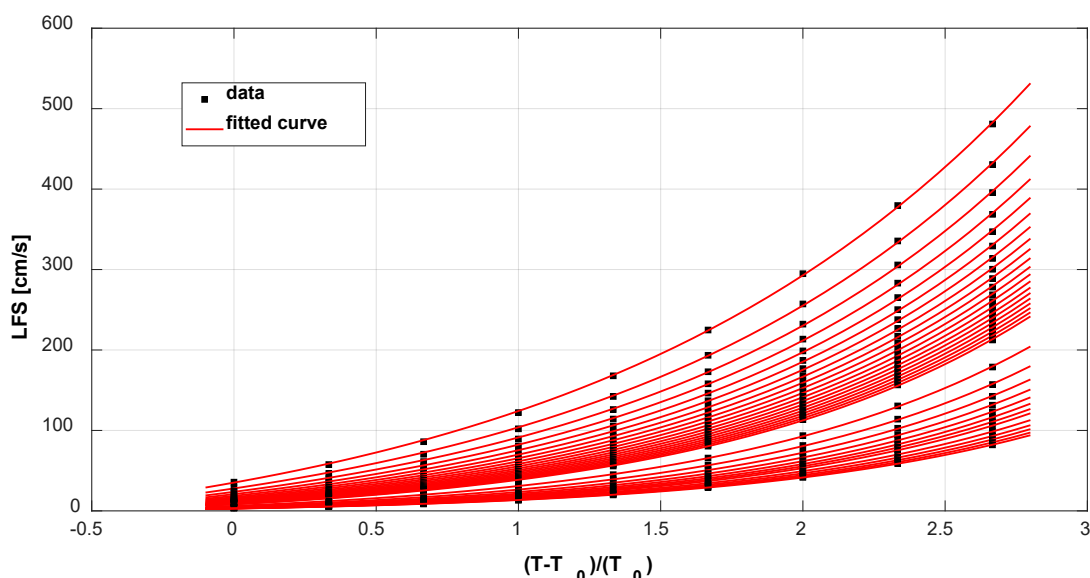


Figura 4.7: Rappresentazione grafica delle curve, definite dalla (4.28), interpolanti i valori di LFS per diversi valori di pressione al variare della temperatura e per EGR=0% e phi=1 [-]

Per ogni curva, rappresentata in rosso in Figura 4.7, relativa ad un dato valore di pressione, si avrà una terna di coefficienti a , b e c , che verrà salvata all'interno della matrice dei coefficienti.

STEP 3:

Tale step prevede l'individuazione di una correlazione, al variare della pressione, per ciascuno dei tre coefficienti presenti nella matrice dei coefficienti. In particolare dalla Figura 4.8 si può notare il trend dei tre coefficienti al variare della pressione.

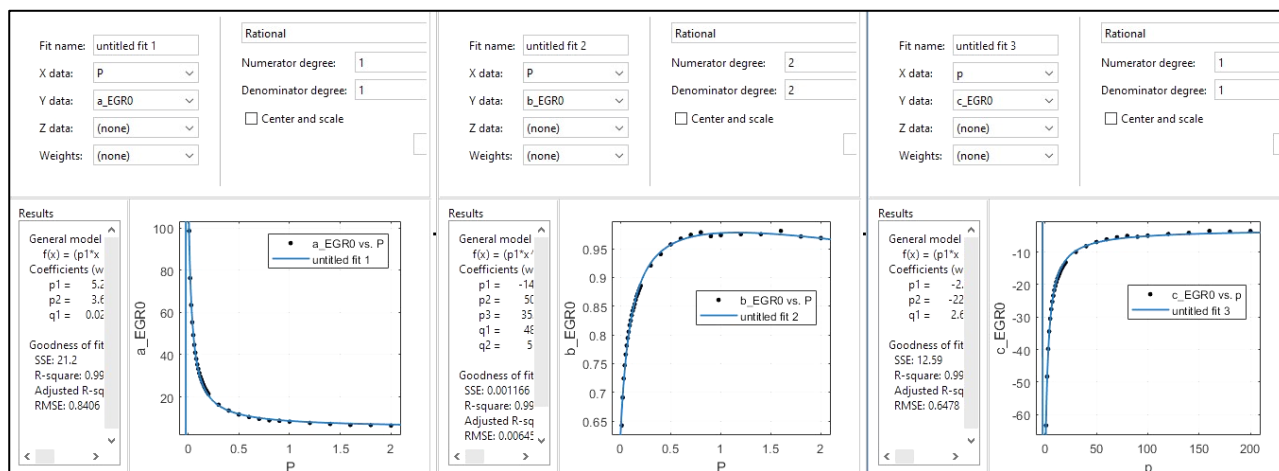


Figura 4.8: Schermata del toolbox Curve Fitting con relativi andamenti dei coefficienti a , b e c al variare della pressione

Per quanto riguarda il modello scelto per l'interpolazione di tali coefficienti, si è scelto di utilizzare la libreria *Rational* implementata su toolbox. Tale libreria permette di interpolare i dati mediante l'utilizzo di funzioni non lineari date dal rapporto fra polinomi, quindi un modello *Ratnm* indica che si è scelto di interpolare con

una funzione avente un polinomio di grado n al numeratore ed uno di grado m al denominatore. In generale, la funzione sarà data da:

$$y = \frac{\sum_{i=1}^{n+1} p_i x^{n+1-i}}{x^m + \sum_{i=1}^m q_i x^{m-i}} \quad (4.37)$$

Dove con n si indica il grado del numeratore, e con m il grado del denominatore.

Quindi, riassumendo:

Coefficienti	Tipo di correlazione	Variabile indipendente	# coefficienti
a	Rat11	Pressione [bar]/100	3
b	Rat22	Pressione [bar]/100	5
c	Rat11	Pressione [bar]	3

Tabella 4.5: Tabella riassuntiva per il terzo step

Si è scelto di scalare l'asse delle ascisse per i coefficienti a e b, di modo da contenere i coefficienti delle relative correlazioni. Quindi per quanto riguarda i coefficienti della correlazione principale (4.28), saranno definiti dalle seguenti correlazioni:

$$a_{EGR=0} = \frac{a_a \left(\frac{p}{100} \right) + b_a}{\left(\frac{p}{100} \right) + c_a} \quad (4.38)$$

$$b_{EGR=0} = \frac{a_b \left(\frac{p}{100} \right)^2 + b_b \left(\frac{p}{100} \right) + c_b}{\left(\frac{p}{100} \right)^2 + d_b \left(\frac{p}{100} \right) + e_b} \quad (4.39)$$

$$c_{EGR=0} = \frac{a_c p + b_c}{p + c_c} \quad (4.40)$$

Con p espresso in [bar].

STEP 4:

Lo step 4 prevede la ripetizione di quanto fatto nello step 3, per diversi valori di EGR. In particolare si andrà a creare una matrice tridimensionale, rappresentata schematicamente in Figura 4.9.

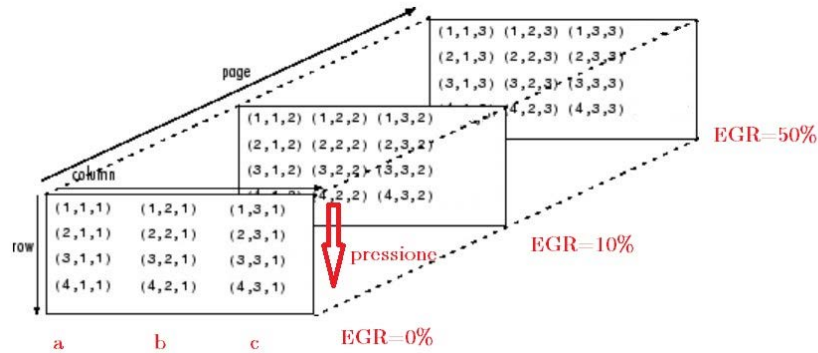


Figura 4.9: Schema rappresentativo della matrice tridimensionale dei coefficienti

In particolare è possibile immaginare tale matrice 3D come un libro, in cui ogni foglio corrisponde ad un dato valore di EGR, lungo le colonne si avranno i tre coefficienti (a, b e c della correlazione principale) e lungo le righe i rispettivi valori al variare della pressione. Quindi ogni foglio della matrice 3D, corrisponde alla matrice in Tabella 4.4, ciascuno per un dato valore di EGR. È da sottolineare il fatto che i modelli scelti non risultano essere affidabili anche per alti valori di EGR, aspetto che porterà ad una restrizione del range di utilizzo della presente correlazione. In questa fase si andranno a creare altre tre matrici, ciascuna per ogni coefficiente a, b e c. Nella tabelle seguenti è riportato il contenuto di ciascuna matrice.

$$a = \frac{a_a \left(\frac{p}{100} \right) + b_a}{\left(\frac{p}{100} \right) + c_a}$$

	a_a	b_a	c_a	R-square
EGR=0%	5.2232	3.6850	0.0287	0.9986
EGR=10%	3.0179	2.3791	0.0234	0.9987
...	...	...	...	...
EGR=50%	-0.0751	0.1503	0.0035	0.987

Tabella 4.6: schema della matrice dei coefficienti per a

$$b = \frac{a_b \left(\frac{p}{100} \right)^2 + b_b \left(\frac{p}{100} \right) + c_b}{\left(\frac{p}{100} \right)^2 + d_b \left(\frac{p}{100} \right) + e_b}$$

	a_b	b_b	c_b	d_b	e_b	R-square
EGR=0%	-239,59	19117,04	1130,56	18726,5	1812,15	0.9962
EGR=10%	-324,18	19846,01	928,95	18011,2	1407,09	0.9944
...	...	...	...	...	...	...
EGR=50%	1,4511	-0,0606	0,0197	-0,09095	0,01758	0.9814

Tabella 4.7: schema della matrice dei coefficienti per b

$$c = \frac{a_c p + b_c}{p + c_c}$$

	a_c	b_c	c_c	R-square
EGR=0%	-2.97	-224.9	2.679	0.998
EGR=10%	-1.80	-158.8	2.473	0.9939
...	...	...	...	...
EGR=50%	0.6871	-53.014	2.525	0.9719

Tabella 4.8: schema della matrice dei coefficienti per c

STEP 5:

In questo ultimo step, si dovrà cercare una correlazione al variare della percentuale di EGR, per i coefficienti delle correlazioni dei coefficienti principali. In altre parole, una volta definite le correlazioni (4.30-4.31-4.32) per ogni valore di EGR, si vuole trovare una correlazione per ogni coefficiente (a_a , b_a , c_c , ...). Nelle tabelle seguente vengono riportate le correlazioni scelte per ciascun coefficiente poc'anzi citato.

Correlazioni per il coefficiente a				
	Tipo di correlazione	# Coefficienti	Vettore dei coefficienti	Variabile indipendente
a_a	Rat02	3	[0.0632 -0.0158 0.0121]	egr [0,1]
b_a	Poly2	3	[14.7443 -14.3807 3.6744]	egr
c_a	Poly3	4	[0.3129 -0.1953 -0.0312 0.0286]	egr

Tabella 4.9: Coefficienti delle correlazioni per il coefficiente a

Correlazioni per il coefficiente b				
	Tipo di correlazione	# Coefficienti	Vettore dei coefficienti	Variabile indipendente
a_b	Poly2	3	[-2.1507 19.5871 -255.94]	$egr \times 100$
b_b	Poly1	2	[91 1.902E04]	$egr \times 100$
c_b	Poly1	2	[-11.88 1.08E03]	$egr \times 100$
d_b	Poly1	2	[-105.83 1.891E04]	$egr \times 100$
e_b	Poly1	2	[-27.49 1.74E03]	$egr \times 100$

Tabella 4.10: Coefficienti delle correlazioni per il coefficiente b

Correlazioni per il coefficiente c				
	Tipo di correlazione	# Coefficienti	Vettore dei coefficienti	Variabile indipendente
a_c	Rat11	3	[3.8180 -1.3853 0.4664]	$egr = [0 \ 0.1 \ 0.2 \ 0.3 \ 0.4 \ 0.5]$
b_c	Poly2	3	[-982.7 846.6 -228.13]	egr
c_c	Rat02	3	[0.2646 -0.0297 0.0992]	egr

Tabella 4.11: Coefficienti delle correlazioni per il coefficiente c

Il numero totale di coefficienti che devono essere salvati per poter utilizzare tale correlazione risulta essere pari a 10 per il coefficiente a, 11 per il coefficiente b e di 9 per il coefficiente c, per un totale di 30 coefficienti. Per quanto riguarda le tabelle precedenti, con Polyn si intende un polinomio di grado n, quindi se n è pari a 2 la correlazione risulta essere (prendendo come esempio il coefficiente a_b):

$$a_b(egr) = p_1(egr \cdot 100)^2 + p_2 \cdot (egr \cdot 100) + p_3$$

E pertanto il vettore dei coefficienti sarà costituito da tre elementi, tabellati nella colonna “Vettore dei coefficienti” in Tabella 4.10. Inoltre si può osservare che per il coefficiente b, in Tabella 4.10, la variabile sia stata scalata, questo per contenere il valore dei coefficienti delle singole correlazioni.

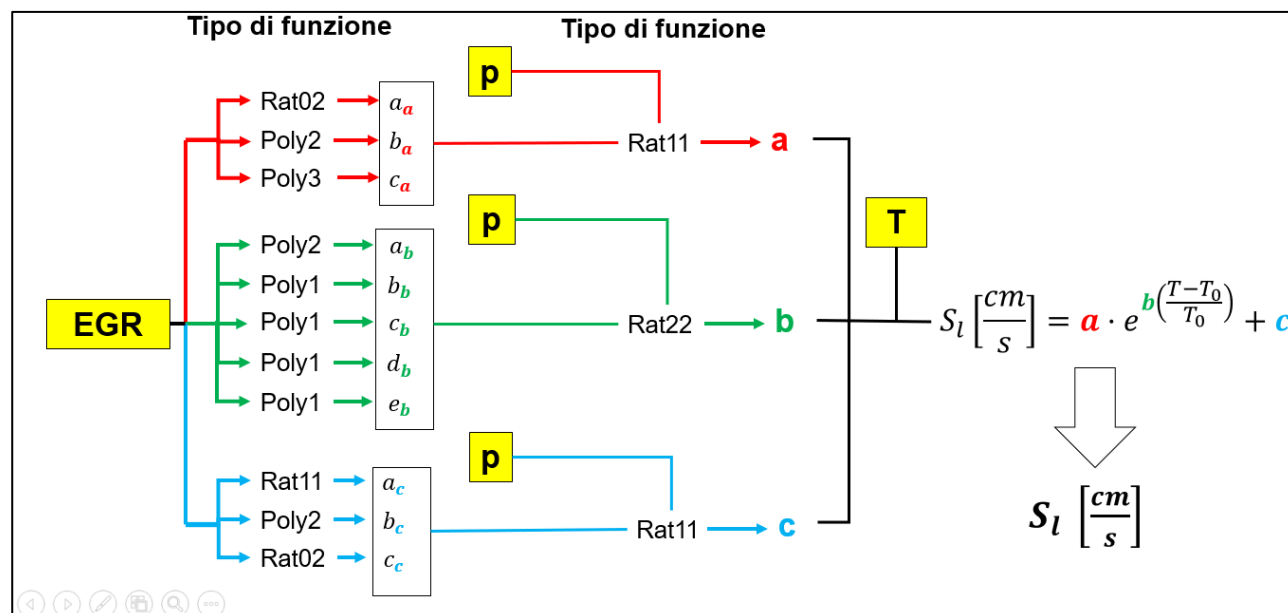


Figura 4.10: Step per l'utilizzo della correlazione GasOn

Facendo riferimento alla Figura 4.10, data una terna di valori di temperatura, pressione e percentuale di EGR, per ottenere il valore della LFS, si dovrà:

- Calcolare tutti i coefficienti contenuti nella Tabella 4.9, Tabella 4.10 e Tabella 4.11 per un dato valore di EGR;

- Una volta calcolati tali coefficienti, si potranno calcolare i coefficienti della correlazione principale, per un dato valore di pressione, utilizzando le correlazioni nella Tabella 4.6, Tabella 4.7 e Tabella 4.8;
- Una volta noti i tre coefficienti principali (**a**, **b** e **c**) si potrà procedere con il calcolo della LFS per un dato valore di temperatura T [K].

Nella Figura 4.11 è possibile osservare una rappresentazione 3D della correlazione, da cui è possibile osservare che per valori di temperatura nell'intorno della pressione ambiente, la dipendenza della LFA dalla pressione decade, stabilizzandosi su un valore di plateau.

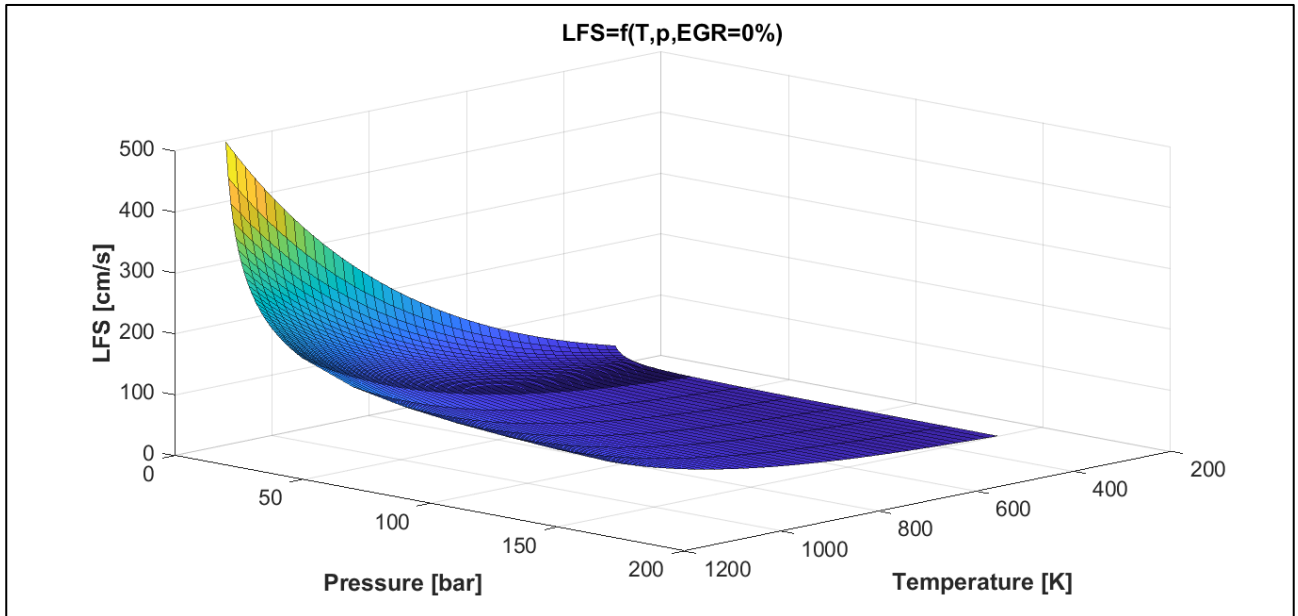


Figura 4.11: Rappresentazione 3D della correlazione GasOn per una miscela metano aria stechiometrica con EGR=0%

4.4 Validazione della correlazione “GASON”

Una volta individuata tale correlazione, è necessario verificare la sua attendibilità in seguito ad un confronto con i dati sperimentali presenti in letteratura e raccolti durante le fasi precedenti di tale lavoro di tesi.

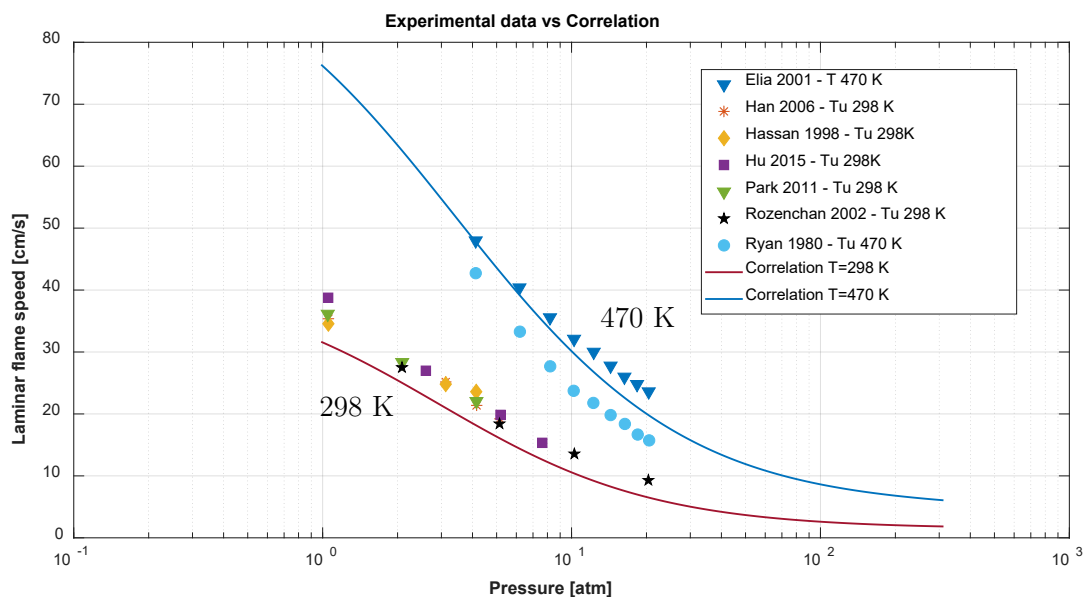


Figura 4.12: Confronto fra correlazione “GASON” e dati sperimentali. CH₄/aria, $\phi=1$, $T=298/472$ K

Si può osservare dalla Figura 4.10, come la correlazione tenda a sottostimare tutti i valori di LFS valutati a temperatura ambiente, mentre per valori di temperatura superiori (470 K), la correlazione si interpone fra i dati sperimentali di Elia et al. e Ryan et al., in particolare risulta essere più prossima al trend dei risultati conseguiti da Elia.

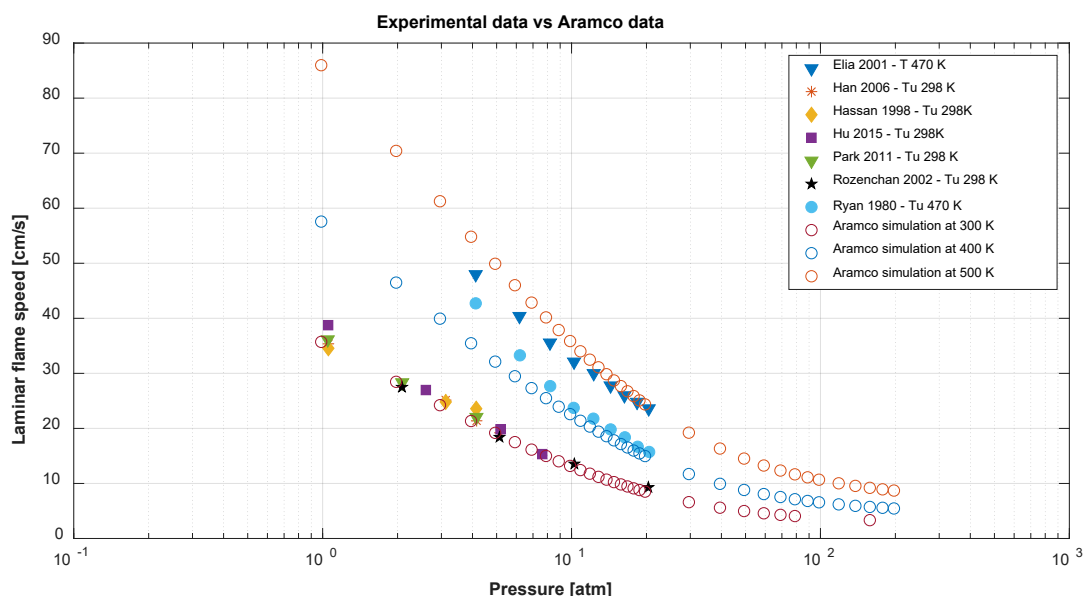


Figura 4.13: Confronto fra i dati sperimentali ed i risultati ottenuti mediante le simulazioni numeriche con LOGE ed il meccanismo Aramco 2.0

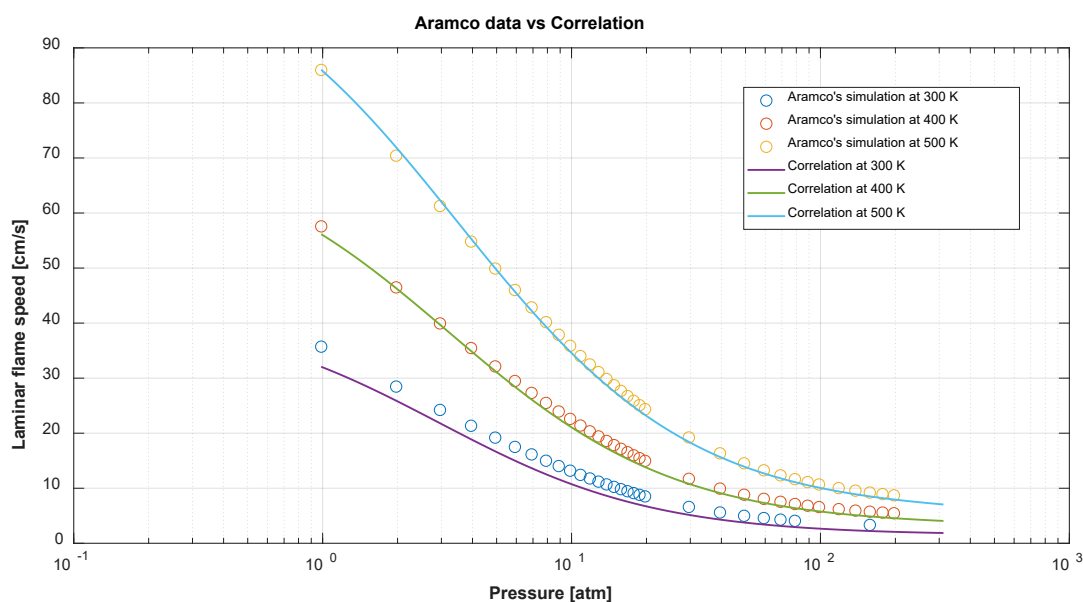


Figura 4.14: Confronto fra dati ottenuti mediante simulazioni numeriche con LOGE, e la correlazione "GASON"

Dalla Figura 4.11 si può notare come i dati numerici ottenuti con il meccanismo Aramco 2.0 siano coerenti con i dati sperimentali, in particolare a temperatura ambiente si può osservare un leggero sottostimare la LFS da parte del meccanismo Aramco 2.0. Per quanto riguarda l'altra temperatura in esame, ovvero 470 K, non avendo a disposizione dati numerici per tale temperatura, si è deciso di riportare i valori immediatamente inferiori e superiori, rispettivamente 300 K e 500 K. Si può osservare come anche in questo caso ci sia una buona coerenza con i dati sperimentali, in quanto contenuti nella forbice delle curve a 300 K e 500 K. Per quanto riguarda la Figura 4.12, si può osservare come la correlazione incominci ad essere attendibile per valori di temperatura superiori a 400 K, andando ad interpolare in maniera corretta tutti i punti simulati con LOGE.

4.4.1 Analisi del residuo

Per spiegare il motivo per cui ci sia questo errore della correlazione a temperatura ambiente, è necessario focalizzare l'attenzione sul residuo, cioè differenza fra il valore esatto ed il valore predetto dalla correlazione.

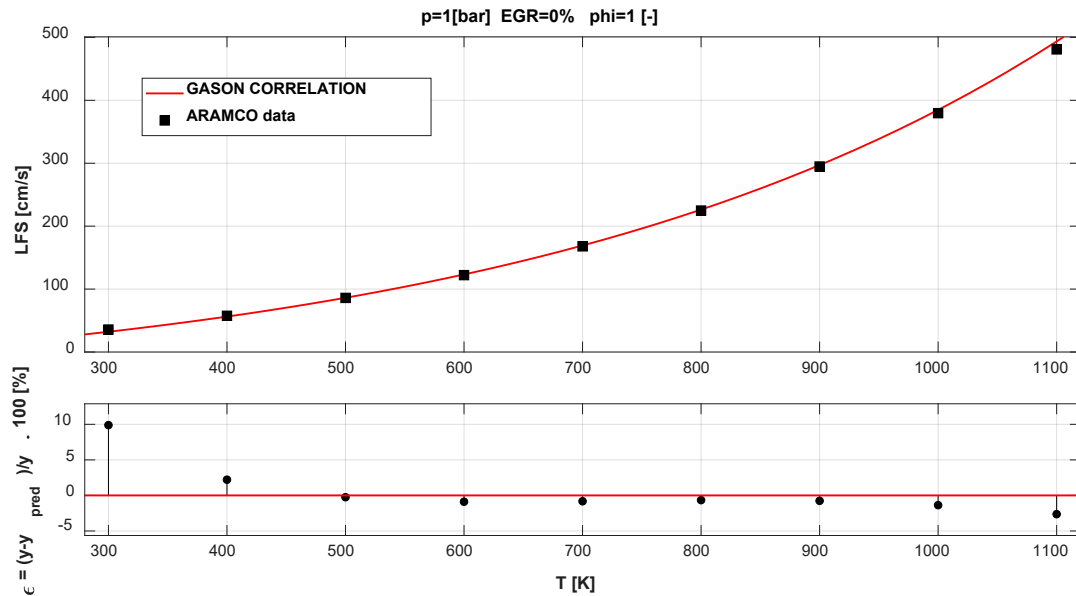


Figura 4.15: Analisi del residuo a $p=1$ bar, $\text{EGR}=0\%$, $\phi=1$

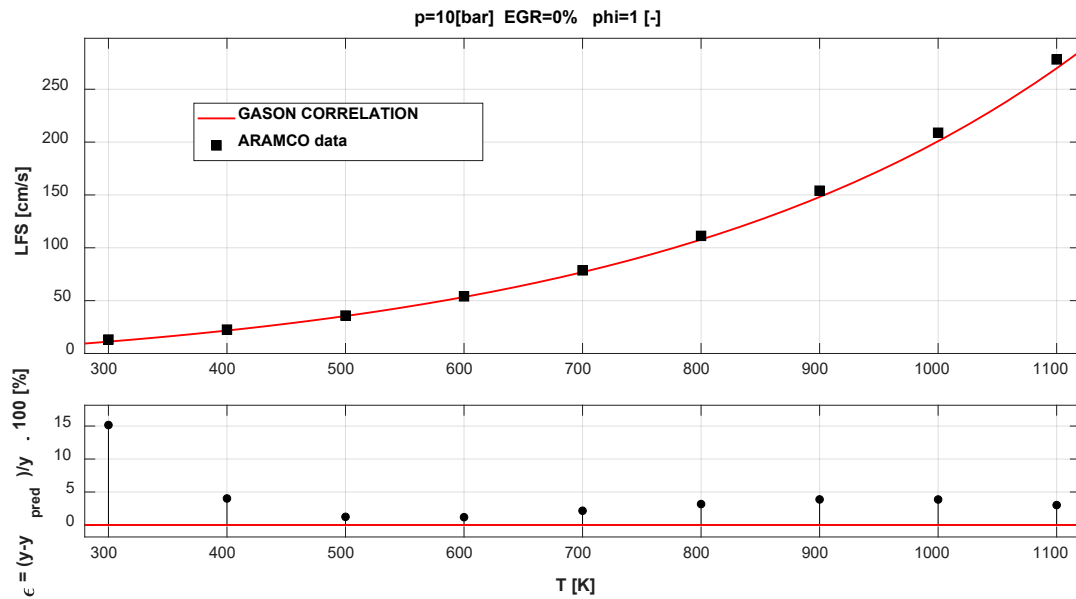


Figura 4.16: Analisi del residuo a $p=10$ bar, $\text{EGR}=0\%$, $\phi=1$

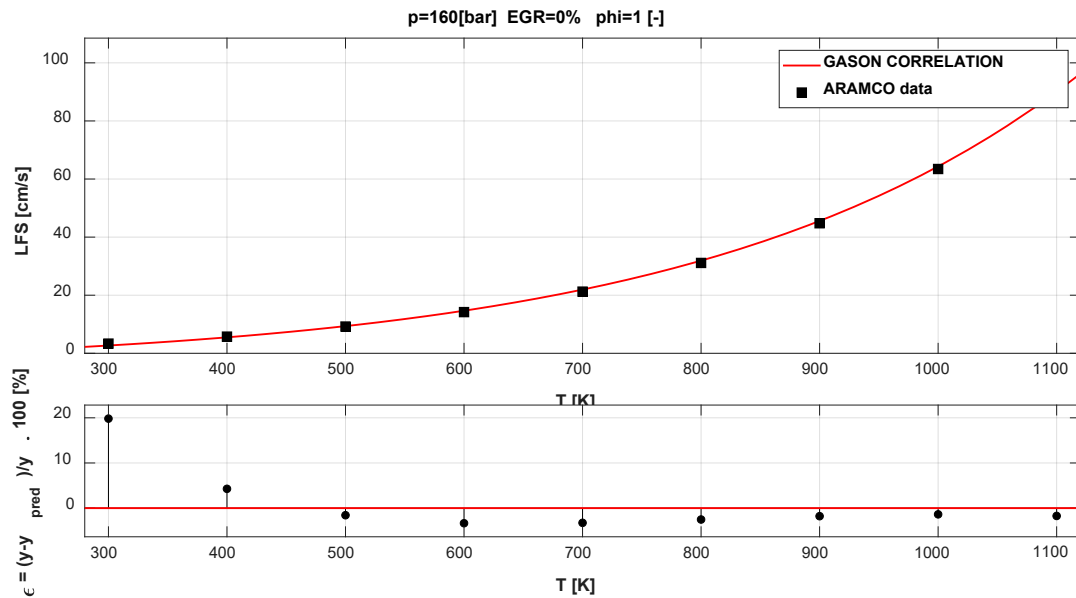


Figura 4.17: Analisi del residuo a $p=160$ bar, $EGR=0\%$, $\phi=1$

Si può osservare che per tutti i valori di pressione riportati nelle figure precedenti, il punto più critico si principalmente quello in prossimità della temperatura ambiente, inoltre per tutti si può osservare che l'errore percentuale rispetto al valore esatto, sia positivo, ciò spiega il perché la correlazione tenda a sottostimare i valori di LFS per $T=298$ K. Per gli altri valori di temperatura, l'errore percentuale risulta essere inferiore al 5% in valore assoluto.

Per risolvere tale problema, si potrebbe pensare di introdurre il concetto dei “pesi”, esposto nei paragrafi precedenti. Infatti, quando si vuole che una curva abbia un certo andamento, nel caso in esame che sia più precisa nell'intorno della temperatura ambiente, si può definire un vettore di pesi; in questo modo si andrà a dare “più importanza” ai punti aventi peso maggiore e “minore importanza” a quelli aventi un peso inferiore. Tali pesi verranno integrati a monte del codice MATLAB con cui è stata eseguita l'analisi dei dati, in particolare durante il secondo step, prima della generazione della matrice tridimensionale dei coefficienti. Per il vettore dei pesi per tutti gli elementi del vettore w si è fissato il valore unitario, mentre per il primo elemento $w(1)$, corrispondente al peso assegnato al primo valore di temperatura (pari a 300 K), si è assegnato un peso pari a quattro risulta essere pari a 4 proprio al fine di diminuire l'errore in corrispondenza della temperatura ambiente.

4.4.2 Risultati della correzione sulla correlazione “GASON”

In seguito vengono riportati gli effetti di tale correzione sulla correlazione, esaminando gli stessi punti visti nel paragrafo precedente. Si può osservare come l'errore percentuale in corrispondenza della temperatura ambiente sia quasi dimezzato, ed in generale la correlazione abbia un errore sul valore finale della LFS minore del 6% per EGR nullo.

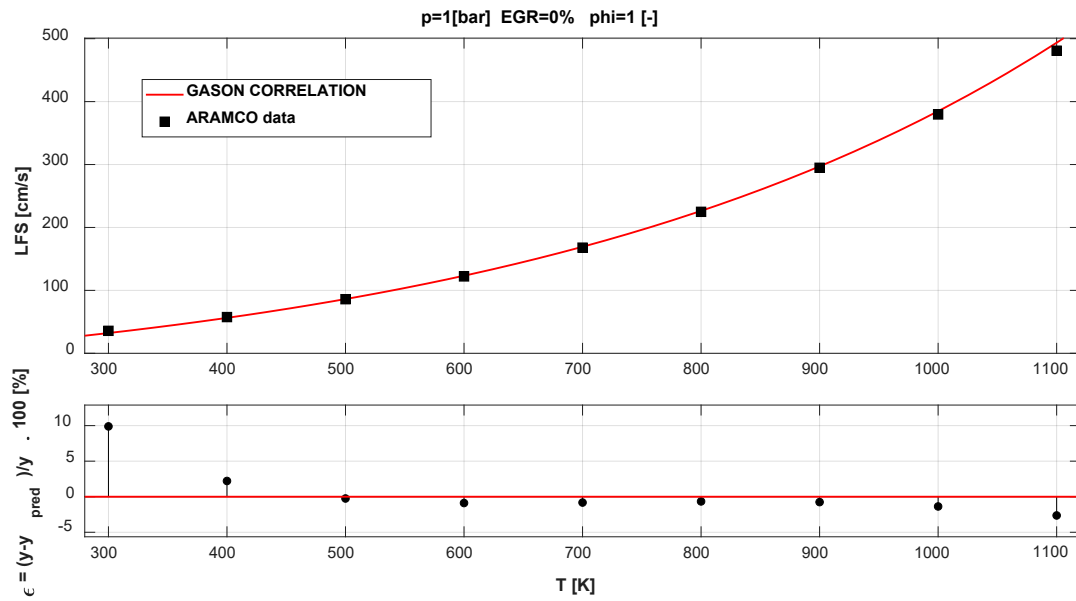


Figura 4.18: Effetto della correzione sulla correlazione "GASON" a $p=1$ bar, $\text{EGR}=0\%$ e $\phi=1$ al variare della T

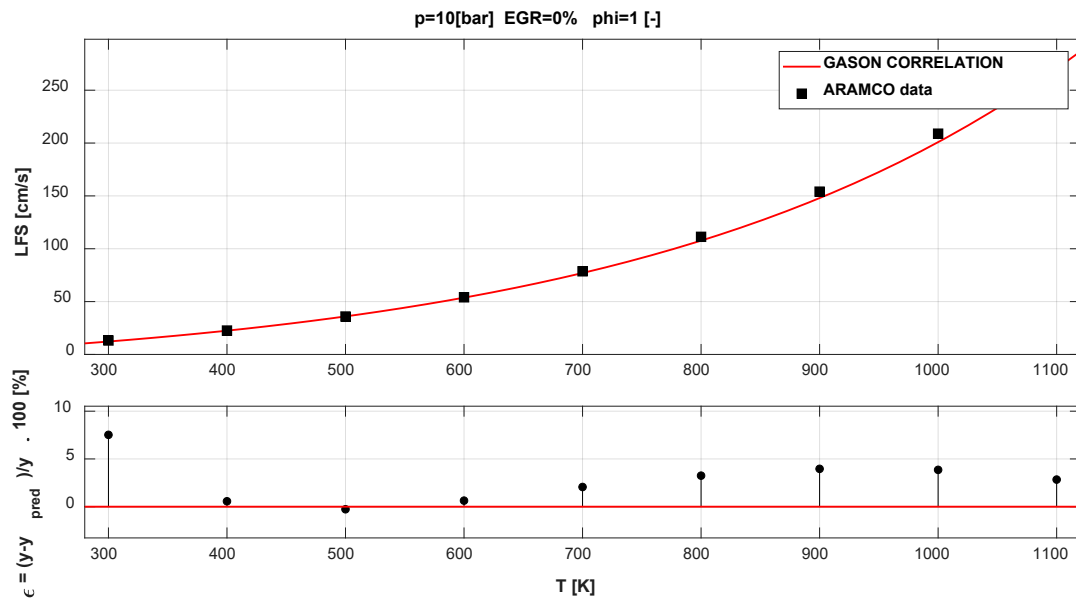


Figura 4.19: Effetto della correzione sulla correlazione "GASON" a $p=10$ bar, $\text{EGR}=0\%$ e $\phi=1$ al variare della T

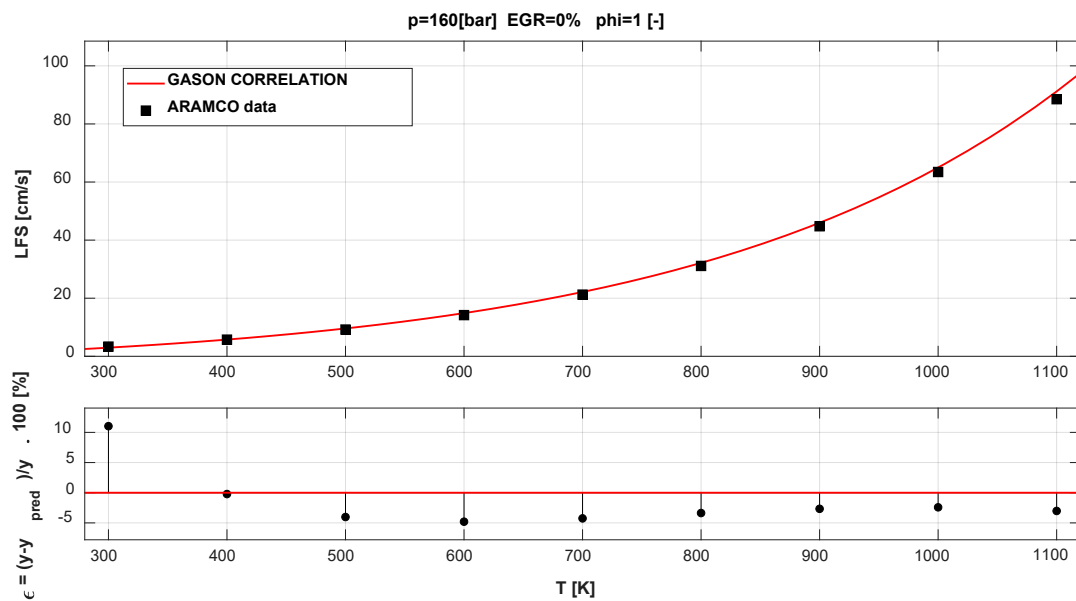


Figura 4.20: Effetto della correzione sulla correlazione "GASON" a $p=160$ bar, $EGR=0\%$ e $\phi=1$ al variare della T

A questo punto è possibile eseguire nuovamente il confronto con i punti sperimentali per verificare i benefici di tale correzione:

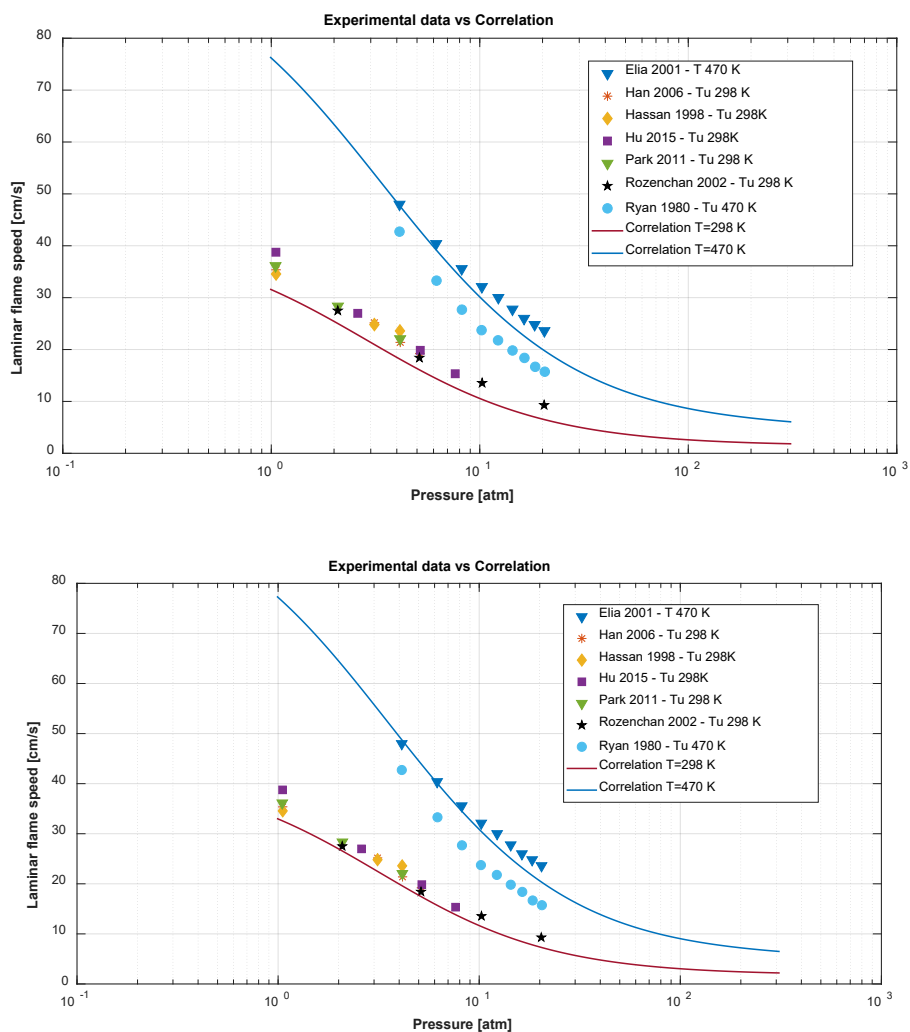


Figura 4.21: Confronto fra correlazione corretta (sotto) e non corretta (sopra)

Si può notare come la correlazione corretta tenda ancora a sottostimare il valore della LFS per $T = 298$ K, sempre in virtù dell'errore percentuale positivo in corrispondenza dei 300 K nella Figura 4.16, Figura 4.17 e Figura 4.18, ma in misura meno accentuata. Anche il confronto con i punti ottenuti mediante simulazione numerica risulta migliorato per entrambi i valori di temperatura in esame.

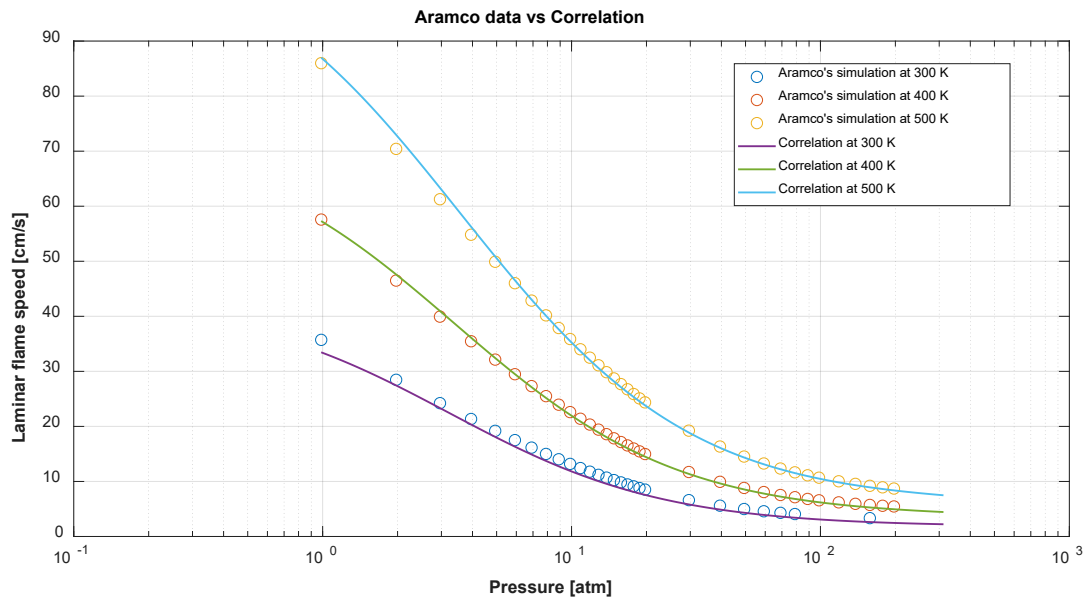


Figura 4.22: Confronto fra correlazione corretta e punti ottenuti per simulazione numerica con LOGE

4.4.3 Range di utilizzo della correlazione “GASON”

Per identificare il range di utilizzo di tale correlazione si potrebbe o fissare un range di errore e quindi escludere i punti che cadono al di fuori di tale range; ad esempio in Figura 4.21 è stato fissato in range del $\pm 6\%$ sul valore predetto della correlazione, quindi la curva inferiore alla correlazione è stata ottenuta moltiplicando per 0.94 e la curva superiore moltiplicando per 1.06. In questo caso, avendo fissato un range di errore del $\pm 6\%$, si potrebbe dire che la correlazione è valida per valori di temperatura maggiori di 400 K, alla pressione di 1 [bar] per una miscela stechiometrica ed in assenza di gas riciclati.

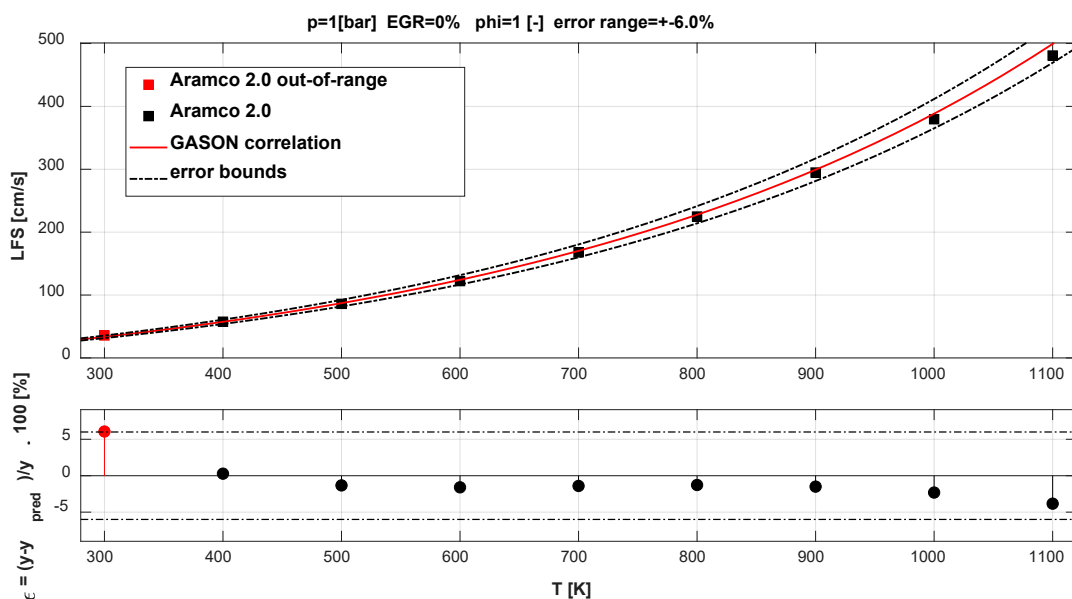


Figura 4.23 : Confronto fra dati numerici e correlazione con banda di errore del $\pm 6\%$

Un altro modo per identificare il range di utilizzo di tale correlazione potrebbe essere quello di scegliere prima un'applicazione di quest'ultima, nel nostro caso per combustione nei motori ad accensione comandata. Una volta identificata la “destinazione d'uso” di tale correlazione, bisogna pensare a come tale correlazione venga

utilizzata da un programma di simulazione termofluidodinamica. Un programma come *Converge*, andrà ad estrarre da ogni cella appartenente alla regione dei *gas incombusti* i valori di pressione, temperatura, densità, percentuale di EGR e così via; in seguito tali valori verranno inseriti all'interno della correlazione e verrà valutato il valore della LFS cella per cella, man mano che il fronte di fiamma avanza. Di conseguenza, è importante stabilire quale sia l'andamento di pressione e temperatura dei *gas incombusti*, durante tutto il processo di combustione, di modo da poter estrarre i valori minimi e massimi di ogni grandezza e quindi analizzare l'errore della correlazione su tale range.

Nel caso di motori ad accensione comandata, valori tipici del rapporto di compressione sono di circa 10-11, questo comporta un valore della temperatura di fine compressione di circa 700 K.

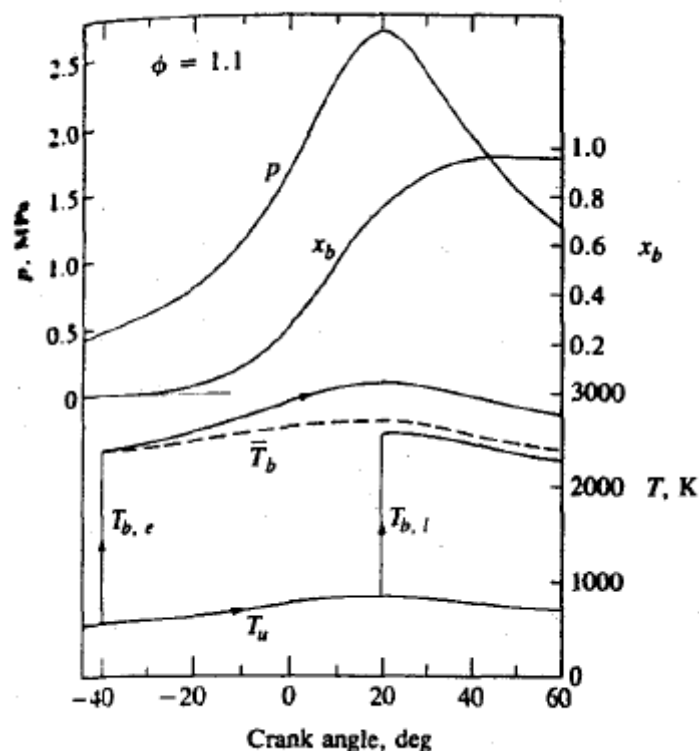


Figura 4.24: Andamento di pressione, frazione di massa bruciata, temperatura dei gas combusti ed incombusti, durante la fase di combustione

Dalla Figura 4.22 si può avere un riscontro di quanto appena detto, osservando che la temperatura dei gas incombusti si aggira fra i 700 e 900 K, aumentando a causa della dilatazione dei gas combusti in seguito alla loro dilatazione. Per quanto riguarda l'andamento della pressione dei gas incombusti, si ricorda che, trattandosi di un processo di deflagrazione la pressione non varia notevolmente attraversando il fronte di fiamma, per cui cresce simultaneamente sia per gas combusti che incombusti durante la combustione della miscela.

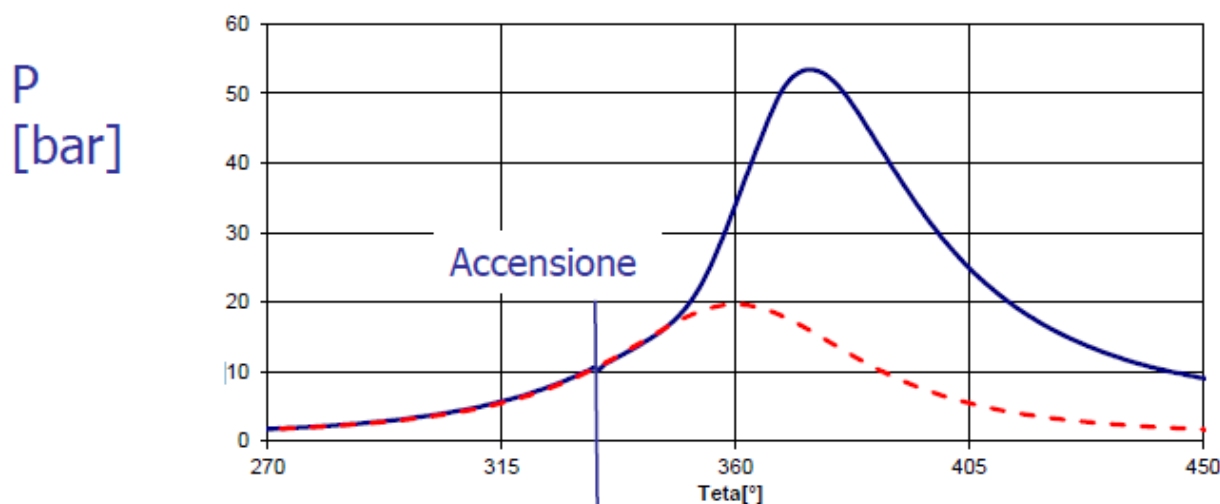


Figura 4.25: Confronto fra ciclo di pressione con combustione (blu) e senza combustione "motored" (rosso)

In realtà, la pressione in camera non varierà in maniera uniforme, perché si avranno onde di pressione che tenderanno ad incrementare la pressione in alcuni punti della camera. Sfruttando i dati riportati in Figura 4.23, la pressione minima alla quale avviene la combustione è di circa 10 [bar], mentre la massima pressione raggiunta in camera, e quindi anche la massima pressione dei gas incombusti, è di circa 60 [bar]. Quindi riassumendo si andrà a verificare l'accuratezza della correlazione nei seguenti range:

- $T \in [700, 1000] K$;
- $p \in [10, 60] bar$;
- $EGR \in [0, 30] \%$.

Nella tabella seguente è sono riportati, per il range di pressione e temperatura sopracitato, l'errore massimo della correlazione per diversi valori di EGR.

$T \in [700, 1000]K \quad p \in [10, 60]bar \quad \phi = 1$	
EGR	Maximum absolute percentage error $\epsilon_{max} = \left \left(\frac{y - \hat{y}}{y} \times 100 \right) \right $
0%	$\approx 5.6\%$
10%	$\approx 9.9\%$
20%	$\approx 13.9\%$
30%	$\approx 11.3\%$

In Figura 4.24 si può osservare come per certi valori di pressione la correlazione risulti essere ancor più precisa, restituendo un errore percentuale massimo, rispetto ai dati numerici, inferiore anche al 5.6%.

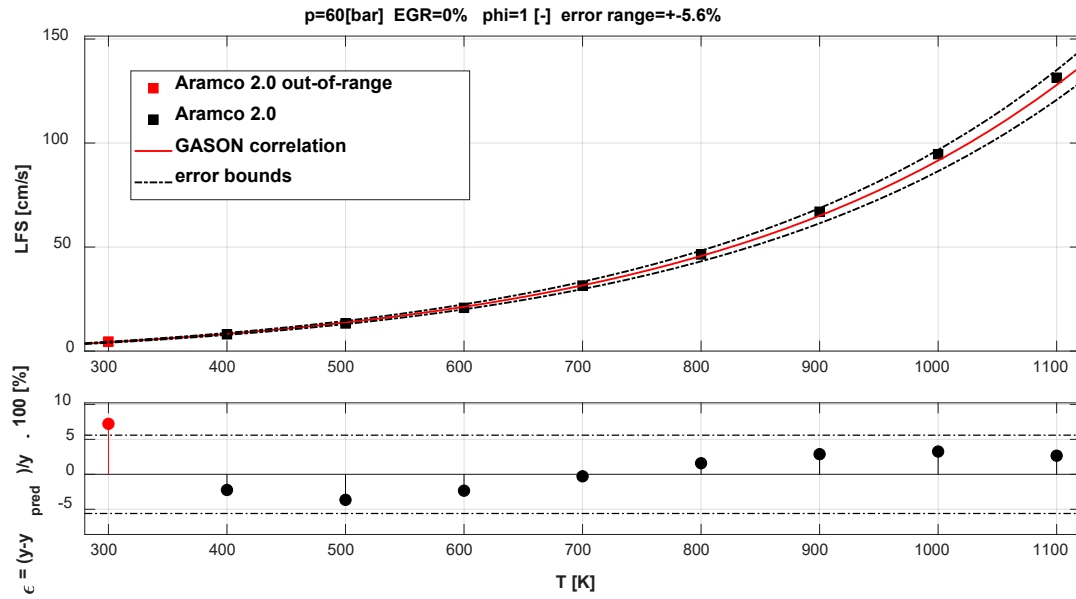


Figura 4.26: Confronto fra correlazione e dati sperimentali per EGR=0%, phi=1

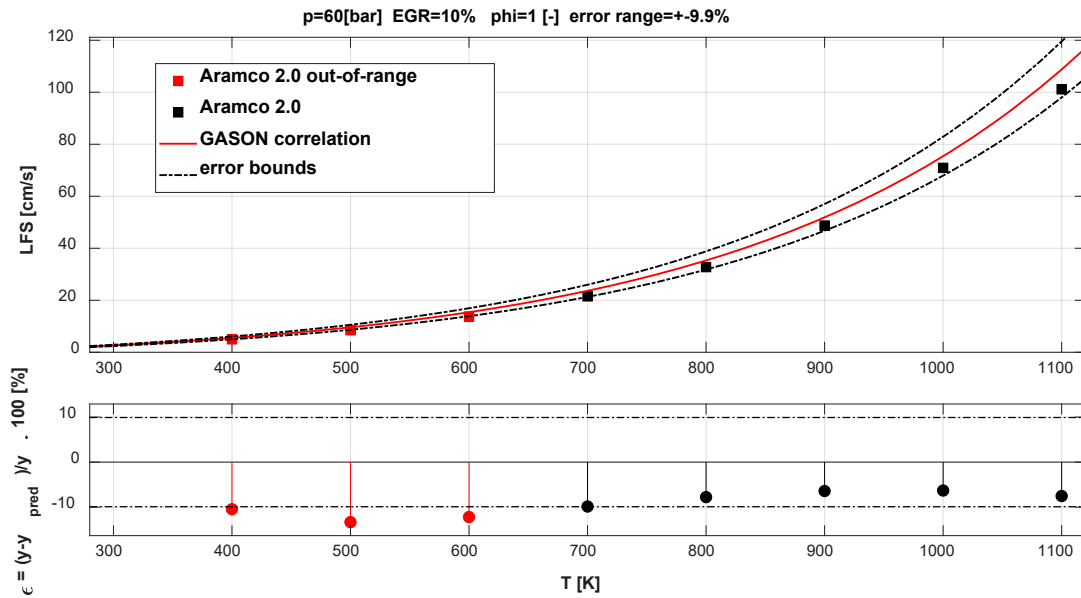


Figura 4.27: Confronto fra correlazione e dati numerici per p=60 bar, EGR=10% e phi=1

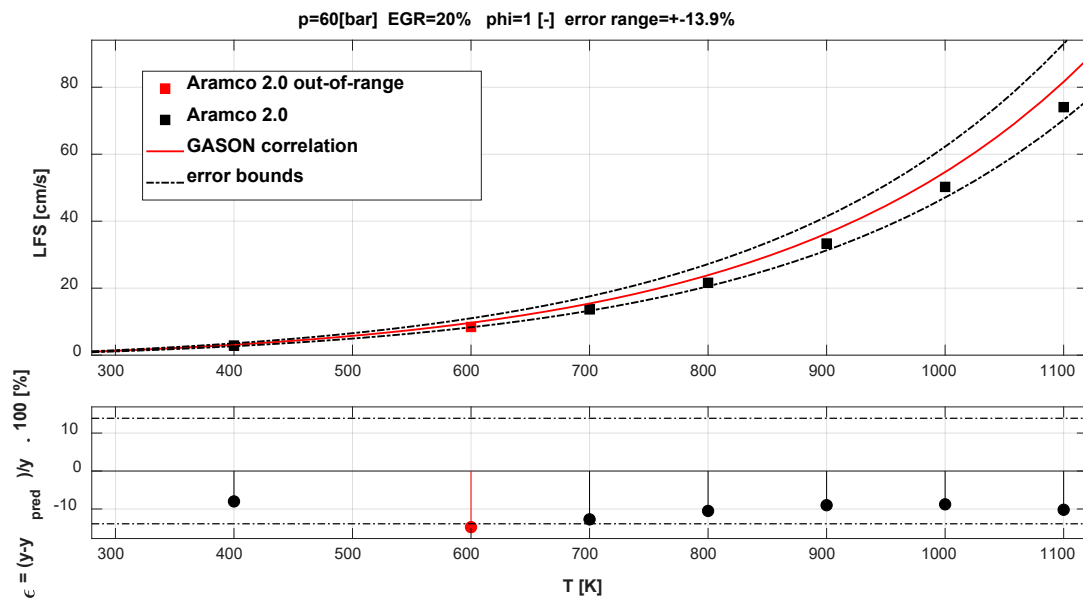


Figura 4.28: Confronto fra correlazione e dati numerici per $p=60$ bar, $EGR=20\%$ e $\phi=1$

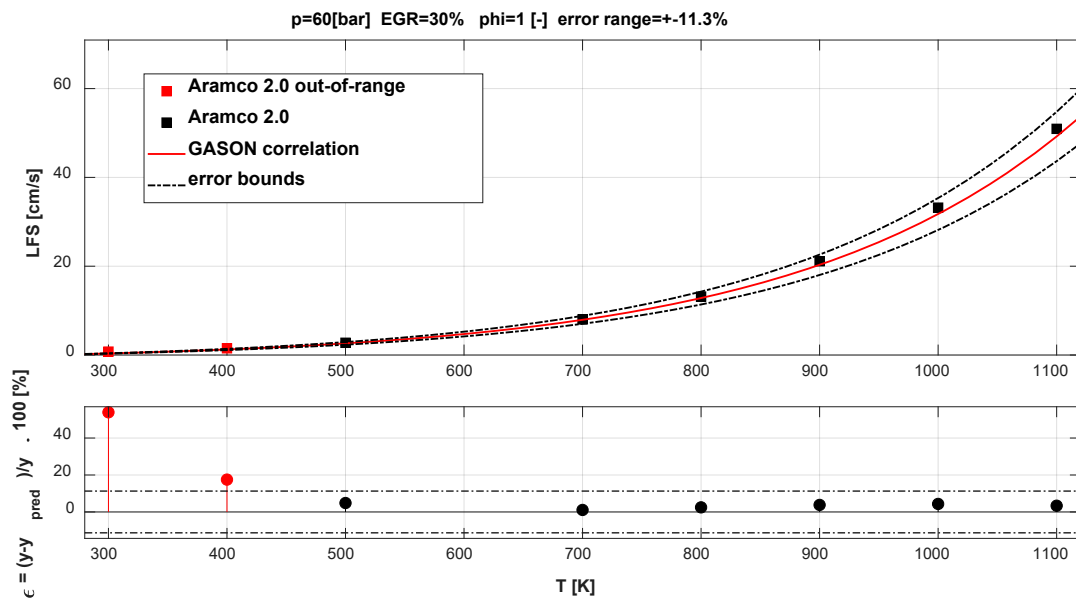


Figura 4.29: Confronto fra correlazione e dati numerici per $p=60$ bar, $EGR=30\%$ e $\phi=1$

In Figura 4.27 si può osservare come in corrispondenza di 600 K non sia stato riportato nessun valore di LFS, ciò è dovuto ad una mancata convergenza del meccanismo Aramco 2.0 in queste particolari condizioni. Si è deciso di riportare, per tutti i valori di EGR l'andamento della LFS al variare della temperatura, alla massima pressione raggiungibile in camera di combustione (Figura 4.23). È importante sottolineare il motivo per cui si è ristretto il range di EGR, pur avendo creato una libreria per valori di EGR sino a 50%; il motivo risiede sempre nella “destinazione d'uso” di tale correlazione, infatti nel caso di motori ad accensione comandata, è molto difficile che si superino valori di EGR del 25%. Questo perché aumentando notevolmente la percentuale di ricircolo dei gas combusti, sebbene si vadano a contenere le temperature massime in camera (e quindi le emissioni di NOx), si va però ad aumentare le emissioni di HC, oltre a rendere il funzionamento del motore meno stabile, in quanto la grossa quantità di inerti in camera ostacolerebbe od addirittura in alcuni casi impedirebbe la combustione (*misfire*).

4.4.4 Futuri lavori sulla correlazione: *machine learning*

Per rendere tale correlazione ancor più completa bisognerebbe implementare la dipendenza dall'*equivalent ratio*, di modo da poter utilizzare tale correlazione anche per valori della dosatura che si discostano leggermente da quella stechiometrica. Volendo seguire l'approccio sinora utilizzato, bisognerebbe capire come variano i coefficienti citati nelle Tabella 4.9, Tabella 4.10 e Tabella 4.11 al variare dell'*equivalent ratio*. Ciò comporterà l'introduzione di altre 30 correlazioni, e nel caso più semplice in cui la dipendenza sia di tipo lineare, di almeno altri 60 coefficienti. È possibile notare come il numero di parametri cresca notevolmente man mano che si aggiungono nuove variabili indipendenti al calcolo della LFS, un approccio alternativo potrebbe essere quello di utilizzo di tecniche di *machine learning* per la predizione dei valori dell'LFS.

5 Validazione CFD con CONVERGE

Un ulteriore modo per permettere il confronto fra i due meccanismi, Aramco 2.0 e GRI.mech 3.0, consiste nell’implementazione delle tabelle di combustione nel programma di simulazione CFD (Computational Fluid Dynamics) Converge. La CFD permette quindi di simulare il moto dei fluidi anche in situazioni piuttosto complesse come nel caso di motori a combustione interna, in cui si hanno fluidi differenti, chimicamente reattivi in cui si verifica anche il fenomeno della combustione.

5.1 PoliTo Engine

In tale lavoro di tesi verranno simulati, mediante l’utilizzo di Converge, diversi punti di lavoro di un motore alimentato interamente a metano, di cui sono riportate le caratteristiche principali in Tabella 5.1. Si è provveduto soltanto all’implementazione delle tabelle di combustione per i due meccanismi Aramco 2.0 e GRI.mech 3.0, oggetto di confronto. L’obiettivo è quello di verificare che il meccanismo Aramco 2.0, a parità di condizioni fluidodinamiche, riesce a simulare in maniera più precisa la combustione in un ciclo motore reale tramite l’utilizzo delle tabelle di combustione.

PoliTo Engine	
Cilindrata unitaria	342 cm ³
Rapporto alesaggio/corsa	72 mm/84 mm
Rapporto di compressione	9.8: 1
Numero di valvole per cilindro	4
Numero di cilindri	4
Camera di combustione	Pent-roof
Valvole di aspirazione	Intervallo angolare di apertura=250 CAD Alzata massima= 7.5 mm
Valvola di scarico	Intervallo angolare di apertura=244 CAD Alzata massima= 7 mm
Sistema di iniezione	Port fuel injection
Turbocompressore	Turbina a geometria fissa/ valvola di wastagate controllata elettronicamente

Tabella 5.1: Caratteristiche principali del POLITO Engine

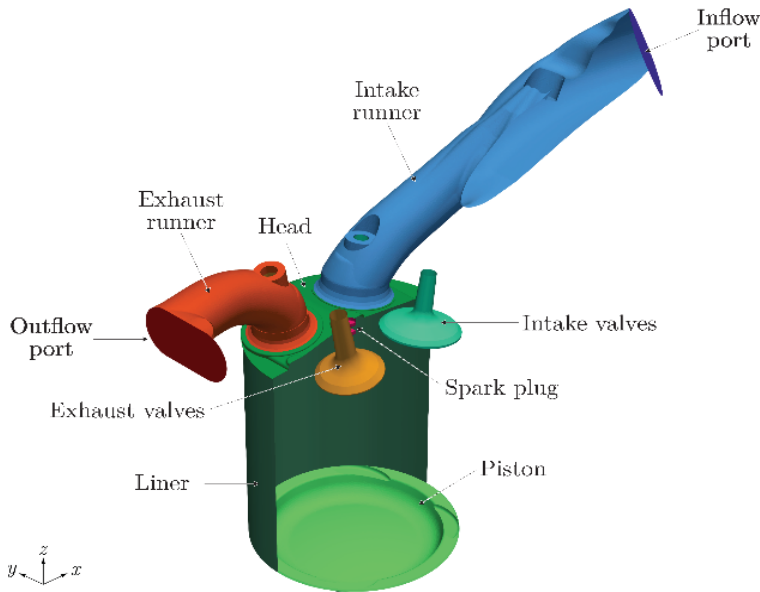


Figura 5.1: POLITO Engine

Al fine di, prima validare le tabelle di combustione generate con Aramco 2.0, ed in seguito confrontare i due meccanismi chimici, è stati simulati i seguenti punti di lavoro del motore in esame:

- $2000 \times 6 \text{ imep}$ (per la validazione delle tabelle Aramco 2.0);
- $3000 \times 8 \text{ imep}$ $EGR = 10\%$;

In particolare le tabelle generate con GRIMech3.0 risultavano poco attendibili per valori di EGR crescenti, non riuscendo a permettere una simulazione adeguata della fase di combustione. Prima di procedere con il confronto dei dati ottenuti dalla simulazione dei diversi punti di lavoro, è bene accennare al set-up numerico del software, che precede la fase di simulazione.

5.2 Setup numerico di Converge

Il setup numerico di un programma di simulazione CFD, consiste nella scelta di appositi modelli numerici che verranno utilizzati dal programma, durante la fase di simulazione, per riprodurre i moti turbolenti dell'aria, la fase di combustione, gli scambi termici che hanno luogo in camera e così via. In tabella xx sono riportate le principali informazioni del setup con sono state eseguite le simulazioni in esame.

Numerical Setup	
Flow	Compressibile
Gas Simulation	Redlich Kwong model
Numerical Method	Implicit method
Turbulence	RNG k- ϵ
Combustion Model	ECFM
Heat transfer model	Angelberger

Tabella 5.2: Setup numerico di Converge

In questo caso il modello di combustione risulta essere accoppiato con le tabelle di combustione, da cui verrà estratto il valore della LFS (mediante interpolazione all'interno delle tabelle di combustione), e grazie al modello ECFM verrà simulato il fenomeno della combustione. Nel caso in cui si volesse implementare una correlazione, essa andrebbe accoppiata al modello ECFM, di modo da fornire in output il valore della LFS. Una volta determinato il valore della LFS, o mediante tabelle o mediante correlazioni, si ha l'input per il modello ECFM che andrà a simulare la combustione accoppiata con il moto turbolento. È importante sottolineare la mutua interazione fra il fenomeno della turbolenza e quello della combustione, infatti quando una fiamma interagisce con un flusso turbolento, la turbolenza stessa viene modificata dalla combustione e viceversa, a causa dei grossi cambiamenti nella viscosità cinematica dovuti alla grossa variazione di temperatura. Questo meccanismo genera turbolenza che prende il nome di *flame generated turbulence*. In altre parole, la turbolenza altera la struttura del fronte di fiamma, e ciò può incentivare la combustione o, in alcuni casi, inibirla completamente. Infatti, alcuni lavori dimostrano che, in particolari condizioni (velocità rotazione dei vortici, dimensioni dei vortici e tempi caratteristici) alcuni vortici possano letteralmente strappare porzioni di materiale preriscaldato, contribuendo ad un raffreddamento del fronte ed in definitiva spegnimento del fronte di fiamma. In Figura 5.2 è possibile notare una rappresentazione schematica di quanto sinora esposto brevemente.

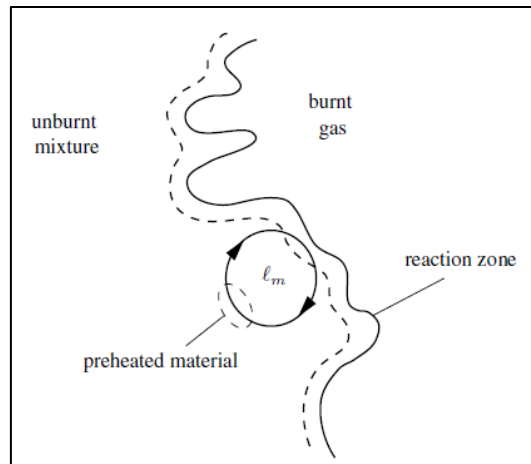


Figura 5.2: Interazione distruttiva fra vortici e fronte di fiamma [10]

Un altro aspetto molto importante in una simulazione CFD riguarda la creazione della mesh, infatti con Converge è possibile andare a rifinire la mesh in maniera ciclica in alcuni punti della camera di combustione, ad esempio poco prima dello scoccare della scintilla, di modo da simulare dettagliatamente i primi istanti di propagazione del fronte. Inoltre è possibile anche andare a rifinire la mesh qual ora ci dovesse essere un gradiente di velocità maggiore di quello settato (ad esempio durante la fase di aspirazione per simulare dettagliatamente il moto del fluido entrante). Oppure qual ora ci dovesse essere un gradiente di temperatura (ad esempio in corrispondenza delle pareti per seguire in maniera più precisa lo scambio termico a parete).

Base Grid	$4 \times 4 \times 4 \text{ mm}$
Cylinder region	
Fixed Embedding	Scale = 1
AMR-Velocity	Sub grid criterion= 1 m/s Scale = 3
AMR- Temperature	Sub-grid criterion= 5 K Scale = 3
Fixed Embedding-spark plug area	Scale = 5

Tabella 5.3: Caratteristiche della mesh nel PoliTo Engine

Quindi per tale simulazione è stata utilizzata una mesh di “base” di 4 mm, quest’ultima poi verrà automaticamente rifinita quando saranno soddisfatti i criteri riportati in Tabella 5.3, rendendola 8 volte più fine, quindi con celle di 0.5 mm; grazie all’ *Adaptive Mesh Refinement*. Mentre nella zona della candela, in maniera ciclica, quindi prima dello scoccare la scintilla, la mesh viene portata da 4 mm a 0.125 mm.

5.3 LFS su Converge

Converge ha essenzialmente quattro metodi per calcolare la laminar flame speed nel caso di combustione premiscelata:

- Correlazione di Metghalchi (1982) (vedi Tabella 4.3);
- Correlazione di Gulder (1984) (vedi Tabella 4.3);
- Tabelle di combustione;
- Cinetica chimica.

Fra quelli elencati, sicuramente la risoluzione della cinetica chimica per ogni cella del dominio interessata dalla combustione, risulta essere il metodo più preciso ma anche più lento, a causa del maggiore costo computazionale. La strada più veloce per il calcolo della LFS risulta essere sicuramente l’utilizzo della correlazione, dove i costi computazionali si riducono alla sola applicazione della correlazione. L’utilizzo delle tabelle di combustione si colloca a metà strada dal punto di vista della precisione e del costo computazionale fra i due metodi sopracitati, questo a causa dell’interpolazione dei valori della LFS dalle look-up table. Tali tabelle di combustione sono generate con dei software di cinetica chimica, esterni a Converge, ed in seguito vengono fornite in input per la simulazione CFD della combustione.

La strada migliore per validare ulteriormente la correlazione GasOn, sarebbe stata l'implementazione di quest'ultima su Converge, ciò però richiede la stesura di un codice da implementare sul software, in quanto in esso sono disponibili solo le correlazioni di Gulder e Metghalchi. Tale obiettivo è stato posticipato a valle di questo lavoro di tesi, preferendo una validazione *intermedia* della correlazione; si è deciso, infatti, di generare delle tabelle di combustione, mediante l'utilizzo della correlazione GasOn. Ciò ha permesso la realizzazione di una tabella di combustione molto consistente, come è possibile constatare dalla Tabella 5.4, a causa del ridotto costo computazionale necessario per la sua realizzazione. La realizzazione di tabelle di combustione di queste dimensioni sarebbe stata impensabile con un programma come LOGEresearch, a causa del notevole costo computazionale.

Tabella di combustione generata con correlazione GasOn	
Variabile	# numero di punti
Temperatura [K]	531
Pressione [bar]	144
Rapporto di equivalenza [-]	1
EGR [-]	5
Numero tot. di valori di LFS	382'320

Tabella 5.4: Tabella di combustione generata con la correlazione GasOn

Il motivo per cui è stata generata una tabella di combustione contenente un numero così elevato di valori di LFS, è per cercare di ridurre il più possibile l'effetto dell'interpolazione derivante dall'utilizzo di look-up table, avvicinandosi il più possibile a quello che sarebbe stato il risultato qualora avessimo implementato la correlazione GasOn su Converge. Inoltre si è voluto comprendere l'impatto che avesse la dimensione della tabella di combustione sui tempi di simulazione dei vari cicli motore.

5.4 PoliTo Engine: 2000×6 imep

Realizzate le tabelle di combustione con il meccanismo Aramco 2.0, GRI-mech 3.0 e con la correlazione GasOn si è proceduto alla loro implementazione su Converge, al fine di simulare un punto di lavoro, il 2000×6 del Polito Engine, sfruttando un case setup precedentemente realizzato.

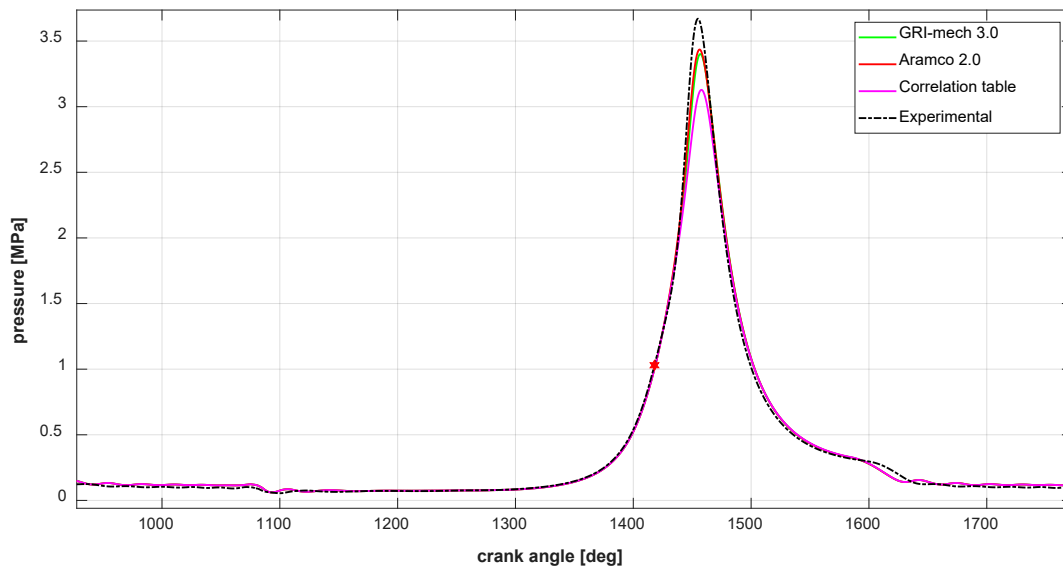


Figura 5.3: Confronto dell'andamento della pressione in camera, al variare dell'angolo di manovella, per il punto di lavoro 2000×6 del Polito Engine con $EGR=0\%$

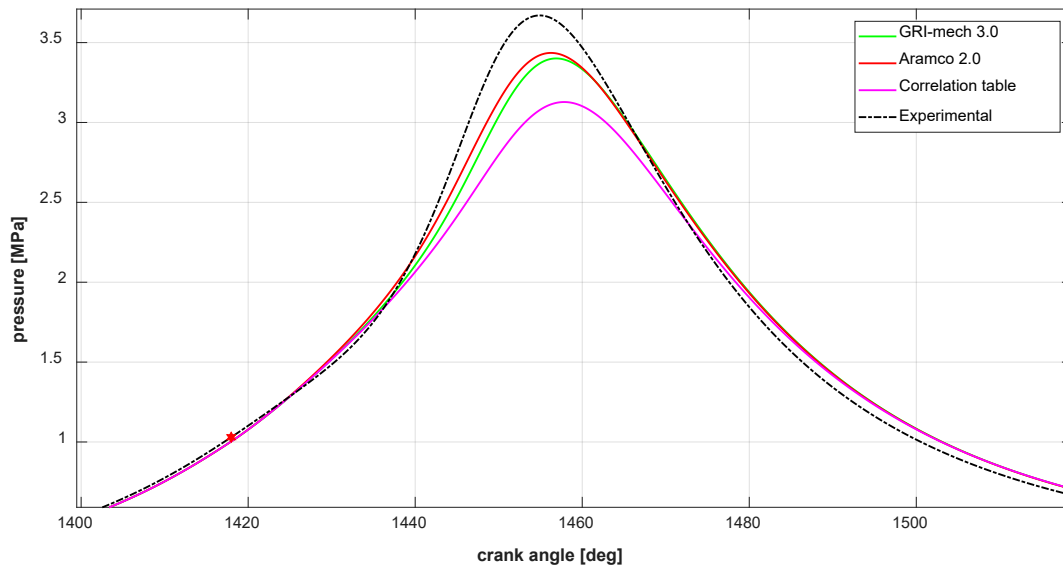


Figura 5.4: Dettaglio della fase di combustione ottenuta mediante simulazione CFD con Converge, e segnale sperimentale

Dalle Figura 5.4 è possibile osservare il dettaglio della fase di combustione ottenuta mediante simulazione CFD con le tre tabelle di combustione, ed il segnale sperimentale della pressione in camera. È stata rilevata una sensibile riduzione dei tempi di simulazione, mediante l'utilizzo di tabelle di combustione generate con la correlazione GasOn. È possibile osservare come il trend della pressione in camera ottenuto mediante tabella GasOn tenda a sottostimare l'andamento della pressione reale, questo potrebbe essere dovuto al fatto che la calibrazione del modello CFD sia stata realizzata sulle tabelle GRI-mech 3.0.

5.5 PoliTo Engine: $3000 \times 8 \text{ imep}$ $EGR = 10\%$

Per questo punto di lavoro a medio carico ed $EGR=10\%$ del motore GasOn, è possibile osservare dai risultati delle simulazioni CFD, come il meccanismo GRImech3.0 comporti un raggiungimento di pressioni massime in camera superiori rispetto al meccanismo Aramco 2.0.

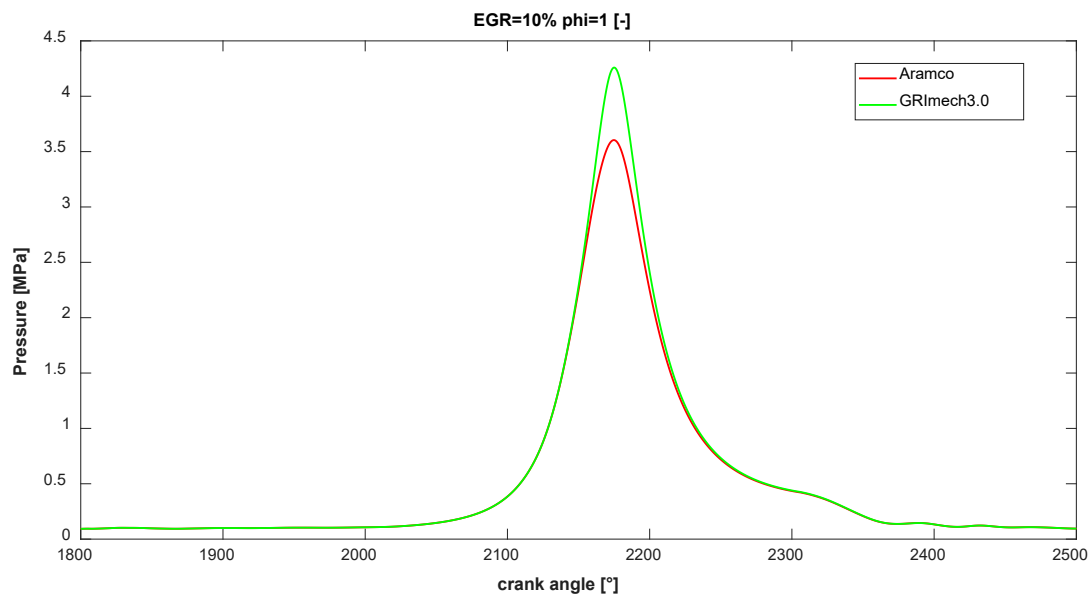


Figura 5.5: Confronto dell'andamento degli andamenti delle pressioni in camera ottenuti con i meccanismi Aramco 2.0 e GRImech 3.0

Si è cercato di trovare una risposta a tale problematica, e si è supposto che tale differenza fra i due trend di pressione, Figura 5.5, sia dovuta ai diversi valori di LFS ottenuti con i due meccanismi in esame. Quindi si è

deciso di diagrammare l'andamento della LFS durante due cicli motore, sia utilizzando il meccanismo Aramco 2.0 che il meccanismo GRI.mech 3.0.

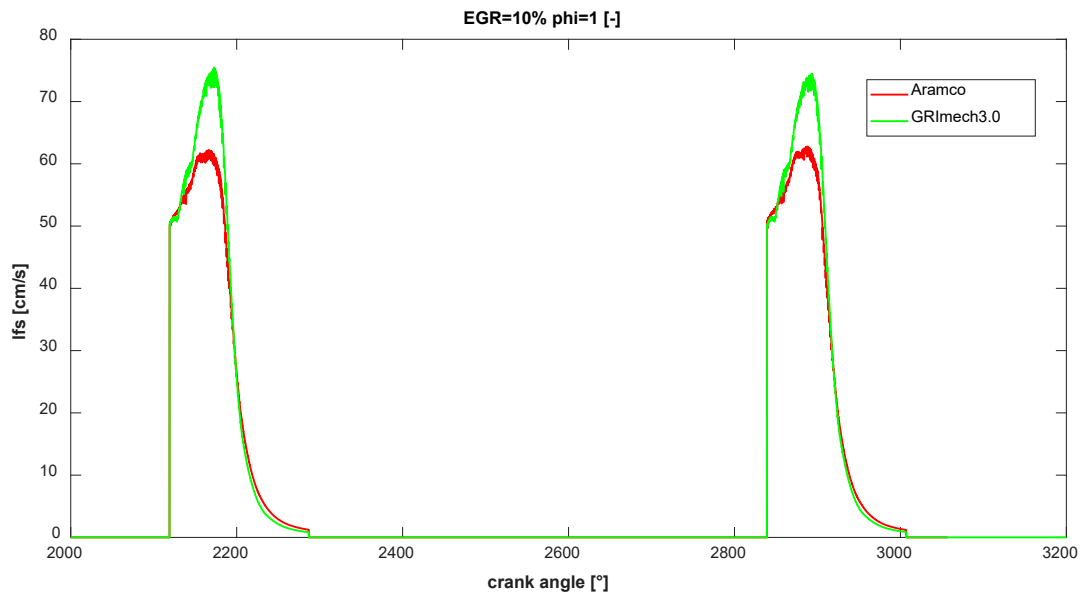


Figura 5.6: Confronto fra gli andamenti della LFS durante due cicli motore, per entrambi i meccanismi in esame

Si può osservare come i valori di LFS, interpolati da Converge dalle *look-up table* generate con GRI.mech3.0, siano in generale superiori a quelli ottenuti con il meccanismo Aramco 2.0. Questo risultato è anche in accordo con un ulteriore confronto eseguito precedentemente in Figura 3.5, dove si è mostrato come il meccanismo GRI-mech 3.0 tenda a sovrastimare il valore della LFS rispetto al meccanismo Aramco, in seguito ad un confronto con i dati sperimentali presenti in letteratura. A causa di tale sovrastima da parte del meccanismo GRI-mech3.0, si avrà uno spostamento del baricentro di combustione verso il PMS, con conseguente aumento delle pressioni massime raggiunte in camera.

6 Conclusioni

Alla luce di tale lavoro di tesi è possibile trarre diverse conclusioni sia per quanto riguarda i meccanismi di cinetica chimica confrontati sia per quanto riguarda la correlazione GasOn sviluppata. Dal confronto dei due meccanismi si evince la notevole precisione del meccanismo Aramco 2.0, rispetto al meccanismo con cui è stato confrontato, GRI-mech 3.0. Tale precisione risulta essere una diretta conseguenza del numero di reazioni e specie chimiche presenti nel meccanismo Aramco 2.0, numero circa dieci volte maggiore nel caso del meccanismo GRI-mech 3.0. In particolare il meccanismo Aramco 2.0 presenta una buona attendibilità per valori elevati di pressione, quindi di particolare interesse nel campo di combustione nei motori ad accensione comandata, dove la combustione viene innescata per pressioni della miscela intorno ai 20 bar.

Sfruttando le tabelle di combustione generate durante il precedente confronto, è stata ricavata una correlazione valida per miscele stechiometriche di metano/aria, con e senza aggiunta di EGR. Affinché tale correlazione possa essere applicata, è necessario disporre di 34 coefficienti, dai quali, forniti i valori di EGR, pressione e temperatura è possibile calcolare in definitiva la LFS. Tale correlazione è stata validata in molteplici modi, in primis con un confronto con i dati sperimentali di LFS presenti in letteratura, mostrando una buona attendibilità per pressioni e temperature superiori a quelle ambiente. Inoltre la correlazione GasOn è stata validata rispetto ai *training data* da cui essa stessa è stata ricavata, mostrando un'ottima approssimazione dei dati numerici ottenuti mediante simulazione con LOGEresearch. Un'ultima validazione è stata conseguita generando tabelle di combustione mediante l'utilizzo della correlazione GasOn, in tal modo la tabella conterrà tutti valori plausibili di LFS, e non casi di mancata convergenza, come nel caso di tabelle ottenute mediante simulazione chimica. L'obiettivo è quello di fare in modo che per ogni terna di valori di temperatura, pressione ed EGR ci sia un valore di LFS, cosa che non sempre accade con programmi di simulazione chimica, soprattutto per elevati valori di EGR.

Le tre tabelle di combustione, ottenute dal meccanismo Aramco 2.0, GRI-mech 3.0 e dalla correlazione GasOn, sono state implementate su un programma di simulazione CFD, simulando diversi punti di lavoro di diversi propulsori, i cui modelli erano stati validati in precedenti lavori del gruppo di ricerca. I risultati mostrano una bassa variabilità ciclica nel caso delle tabelle di combustione generate con Aramco 2.0, indice di una buona stabilità del modello. Inoltre, è stata riscontrata una notevole riduzione dei tempi di simulazione, nel caso di utilizzo della tabella di combustione generata dalla correlazione GasOn; questo potrebbe essere dovuto alle notevoli dimensioni della stessa. In definitiva tutte e tre le tabelle di combustione risultano essere utilizzabili sul software di simulazione CFD, permettendo una buona simulazione di tutto il ciclo motore.

Futuri lavori prevedono l'implementazione di tale correlazione su Converge CFD, in tal modo si andrebbe a simulare la fase di combustione con un costo computazionale notevolmente ridotto, evitando l'utilizzo di *look-up table*. Inoltre si potrebbe aggiungere l'ultima variabile indipendente alla correlazione GasOn, ovvero la dosatura della miscela, ma con un approccio di tipo *curve-fitting* il numero di coefficienti crescerebbe ulteriormente. Quindi la soluzione più promettente risulta essere sicuramente un approccio di tipo *machine learning*, fornendo in input i dati ottenuti mediante simulazioni chimica con LOGEresearch.

Bibliografia

- [1] S. Di Iorio, P. Sementa, and B. M. Vaglieco, "Experimental investigation on the combustion process in a spark ignition optically accessible engine fueled with methane/hydrogen blends," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 39, no. 18, pp. 9809–9823, 2014.
- [2] A. Cavaliere, *Lezioni di Combustione – Parte II*. Napoli.
- [3] F. Taylor, *The Internal-Combustion Engine in Theory and Practice*, vol. 11. .
- [4] G. Ferrari, "Motori a combustione interna." .
- [5] E. Spessa, "Appunti 'Combustion and Emissions in SI engines.'"
- [6] F. Millo, "Appunti di Propulsori Termici," 2019.
- [7] R. Amirante, E. Distaso, P. Tamburrano, and R. D. Reitz, "Laminar flame speed correlations for methane, ethane, propane and their mixtures, and natural gas and gasoline for spark-ignition engine simulations," *Int J Engine Res*, vol. 18, no. 9, pp. 951–970, 2017.
- [8] B. Galmiche, F. Halter, F. Foucher, and P. Dagaut, "Effects of dilution on laminar burning velocity of premixed methane/air flames," *Energy and Fuels*, vol. 25, no. 3, pp. 948–954, 2011.
- [9] F. N. Egolfopoulos, "Laminar Flame Speed : What Do We Measure ? What Do We Report ? What Do We Learn ? How Do We Use It ?," 2012.
- [10] N. Peters, R. Aachen, and D. Forschungsgemeinschaft, *Turbulent Combustion*. 1994.
- [11] M. Faghih and Z. Chen, "The constant-volume propagating spherical flame method for laminar flame speed measurement," *Sci Bull*, vol. 61, no. 16, pp. 1296–1310, 2016.
- [12] J. Beeckmann, R. Hesse, F. Bejot, N. Xu, and H. Pitsch, "Assessment of the Approximation Formula for the Calculation of Methane/Air Laminar Burning Velocities Used in Engine Combustion Models," *SAE Tech Pap Ser*, vol. 1, 2017.
- [13] M. P. Burke, Z. Chen, Y. Ju, and F. L. Dryer, "Effect of cylindrical confinement on the determination of laminar flame speeds using outwardly propagating flames," *Combust Flame*, vol. 156, no. 4, pp. 771–779, 2009.
- [14] M. Elia, M. Ulinski, and M. Metghalchi, "Laminar Burning Velocity of Methane – Air – Diluent Mixtures," vol. 123, no. January 2001, pp. 190–196, 2019.
- [15] W. Lowry, J. De Vries, M. Krejci, E. Petersen, and W. Metcalfe, "Measurements and Modeling of Pure Alkanes and Alkane Blends," vol. 133, no. September 2011, pp. 1–9, 2015.
- [16] W. K. Metcalfe, S. M. Burke, S. S. Ahmed, and H. J. Curran, "A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C1 - C2 hydrocarbon and oxygenated fuels," *Int J Chem Kinet*, 2013.
- [17] Y. Li, C. W. Zhou, K. P. Somers, K. Zhang, and H. J. Curran, "The oxidation of 2-butene: A high pressure ignition delay, kinetic modeling study and reactivity comparison with isobutene and 1-butene," *Proc Combust Inst*, vol. 36, no. 1, pp. 403–411, 2017.
- [18] C. W. Zhou *et al.*, "A comprehensive experimental and modeling study of isobutene oxidation," *Combust Flame*, 2016.
- [19] C. M. Vagelopoulos and F. N. Egolfopoulos, "Direct experimental determination of laminar flame speeds," in *Symposium (International) on Combustion*, 1998.
- [20] C. M. Vagelopoulos, F. N. Egolfopoulos, and C. K. Law, "Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin-flame technique," *Symp Combust*, 1994.

-
- [21] Han P, Checkel MD, Fleck BA and Nowicki NL. Burning velocity of methane/diluent mixture with reformer gas addition. *Fuel* 2007; 86: 585–596.
- [22] Ouimette P and Seers P. Numerical comparison of premixed laminar flame velocity of methane and wood syngas. *Fuel* 2009; 88: 528–533.
- [23] Liao SY, Jiang DM and Cheng Q. Determination of laminar burning velocities for natural gas. *Fuel* 2004; 83:1247–1250.
- [24] Dirrenberger P, Gall L, Bounaceur R, Herbinet O, Glaude P, Konnov A, et al. Measurements of laminar flame velocity for components of natural gas. *Energ Fuel* 2011; 25: 3875–3884.
- [25] Huzayyin AS, Moneib HA, Shehatta MS and Attia AMA. Laminar burning velocity and explosion index of LPG–air and propane–air mixtures. *Fuel* 2008; 87: 39–57.
- [26] Choi M, Song J and Park S. Modeling of the fuel injection and combustion process in a CNG direct injection engine. *Fuel* 2016; 179: 168–178.
- [27] Shiga S, Ozone S, Machacon HTC, Karasawa T, Nakamura H, Ueda T, et al. A study of the combustion and emission characteristics of compressed-natural-gas direct injection stratified combustion using a rapid-compression- machine. *Combust Flame* 2002; 129: 1–10.
- [28] Zeng K, Huang Z, Liu B, Liu L, Jiang D, Ren Y, et al. Combustion characteristics of a direct-injection natural gas engine under various fuel injection timings. *Appl Therm Eng* 2006; 26: 806–813.
- [29] Hofmann P, Hofherr T, Hoffmann G and Preuhs J-F. Potential of CNG direct injection for downsizing engines. *MTZ Worldw* 2016; 77: 28–35.
- [30] Goswami M, Derks SCR, Coumans K, Slikker
- [31] WJ, de Andrade Oliveira MH, Bastiaans RJM, et al. The effect of elevated pressures on the laminar burning velocity of methane + air mixtures. *Combust Flame* 2013; 160: 1627–1635.
- [32] Rallis CJ and Garforth AM. The determination of laminar burning velocity. *Prog Energ Combust* 1980; 6: 303–329.
- [33] Coppens FHV, De Ruyck J and Konnov AA. The effects of composition on burning velocity and nitric oxide formation + N₂. *Combust Flame* 2007; 149: 409–417.