

POLITECNICO DI MILANO

Facoltà di Ingegneria dei Processi Industriali

Dipartimento di Chimica, Materiali e Ingegneria Chimica
“Giulio Natta”



Tesi di Laurea Magistrale

**Caratterizzazione della Combustione di
n-Eptano in un Motore HCCI**

Relatore: Tiziano Faravelli

Correlatore: Alessio Frassoldati

Candidato:

Alessandra Nicastro

Matr. n. 734458

Anno Accademico 2009/2010

INDICE

INDICE DELLE FIGURE	2
INDICE DELLE TABELLE	4
INDICE DEI GRAFICI	4
INTRODUZIONE	6
1. MOTORI A COMBUSTIONE INTERNA	8
1.1. Motori ad accensione comandata	9
1.2. Motori ad accensione spontanea	11
1.3. Problematiche annesse ai motori a combustione interna	12
1.3.1. Problematiche energetiche	12
1.3.2. Problematiche ambientali	15
2. COMBUSTIONE HCCI	26
2.1. Background storico	28
2.2. Elementi fondamentali della combustione HCCI	29
2.2.1. Creazione carica omogenea	29
2.2.2. Autoignizione	31
2.2.3. Controllo della combustione HCCI	34
2.2.4. Sviluppi futuri	41
3. MODELLAZIONE DI MOTORI HCCI	42
3.1. Modello multi-zona Open_Smoke	45
4. IL MECCANISMO CINETICO	52
4.1. La chimica del processo in dettaglio	52
4.2. Cinetiche di auto ignizione	53
4.3. Combustione di alcani	53
4.4. Sviluppo inquinanti	56
5. RISULTATI	58
5.1. Descrizione del sistema sperimentale	58
5.2. Descrizione del sistema modellistico	59
5.3. Mappe di operabilità	60
5.4. Altri confronti	69
6. CONCLUSIONI	79
APPENDICE A: Dati relativi alle emissioni inquinanti nel settore trasporti	80
BIBLIOGRAFIA	86

INDICE DELLE FIGURE

Figura 1. 1: Motore a combustione interna <i>Fonte: http://www.biketrainer.it.....</i>	8
Figura 1. 2: Consumo di energia nel settore trasporti dal 1949 al 2009 <i>Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information administration</i>	13
Figura 1. 3: Andamento del prezzo del petrolio dal 1950 al 2008 <i>Fonte: BP Statistical Review of World Energy.....</i>	13
Figura 1. 4: Andamento della produzione e delle riserve provate di petrolio dal 1977 al 2008 <i>Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information administration</i>	14
Figura 1. 5: Efficienza di consumo per diverse categorie di veicoli <i>Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information administration</i>	15
Figura 1. 6: Consumo di carburante per diverse categorie di veicoli <i>Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information Administration.....</i>	15
Figura 1. 7: Limite delle emissioni per autoveicoli leggeri a benzina <i>Fonte: http://www.dieselnets.com/standards/eu/ld.html</i>	20
Figura 1. 8: Limite delle emissioni per autoveicoli leggeri a gasolio <i>Fonte: http://www.dieselnets.com/standards/eu/ld.html</i>	20
Figura 1. 9: Schema di funzionamento di una fuel cell <i>Fonte:</i> <i>http://tylerdoesscience.blogs.wm.edu/.....</i>	21
Figura 1. 10: Principio di funzionamento della marmitta catalitica <i>Fonte:http://it.wikipedia.org</i>	22
Figura 1. 11: Principio di funzionamento del sistema di riduzione catalitica selettiva <i>Fonte: http://www.airprotech.eu/denox.php</i>	24
Figura 1. 12: Schema di un filtro anti-particolato <i>Fonte:</i> <i>http://bznotes.wordpress.com/2007/01/.....</i>	25

Figura 2. 1: Confronto tra i diversi tipi di motori a combustione interna <i>Fonte: (Zhao, 2007)</i>	26
Figura 2. 2: Andamento della pressione in funzione del tempo nel caso di autoaccensione a due stadi (a) e a stadio singolo (b) <i>Fonte: http://teresa.donateo.unisalento.it</i>	33
Figura 2. 3: Andamento della temperatura di accensione in funzione della pressione per idrocarburi differenti <i>Fonte: http://teresa.donateo.unisalento.it</i>	34
Figura 2. 4: Tecnologia EGR a riaspirazione <i>Fonte: http://www.foursprung.com/2006/08/eco-new-egr-reduces-emissions.html</i>	37
Figura 3. 1: Schematizzazione del modello a due zone <i>Fonte: Fiveland e Assanis, 2001</i>	43
Figura 3. 2: Schematizzazione del modello multizona di Komninos: a) Discrezione spaziale; b) storia della temperatura <i>Fonte: Komninos et al., 2004</i>	43
Figura 4. 1: Meccanismo di ossidazione di bassa temperatura per il n-eptano <i>Fonte: (Mehl, PhD Thesis , 2007)</i>	55
Figura 4. 2: Meccanismo di ossidazione di bassa temperatura per l'isottano <i>Fonte: (Mehl, PhD Thesis , 2007)</i>	56
Figura APP.A 1: Emissioni di Gas serra per settore economico	79

INDICE DELLE TABELLE

Tabella 5. 1: Caratteristiche del motore da ricerca Ricardo E6	58
Tabella 5. 2: Condizioni operative del motore da ricerca Ricardo E6.....	59
Tabella 5. 3: Descrizione delle zone del modello multi - zona	59
Tabella APP.A 1: Emissioni di gas serra in relazione al tipo di veicolo (Tg CO ₂ eq.)	79
Tabella APP.A 2: Emissione di gas serra in relazione al tipo di combustibile utilizzato e al settore di utilizzo (Tg CO ₂ eq.)	79
Tabella APP.A 3: Emissioni di NO _x , CO, NMVOCs e SO ₂ in relazione a diverse attività (Gg)	79

INDICE DEI GRAFICI

Grafico 5. 1: Confronto Temperatura Alimentazione Carica a 30°C e 105°C.....	61
Grafico 5. 2: Confronto Temperatura Massima - Dati Sperimentali/Prove a 30°C	61
Grafico 5. 3: Mappa di Operabilità con temperatura della carica pari a 30°C....	66
Grafico 5. 4: Mappa di Operabilità con temperatura della carica pari a 105°C..	66
Grafico 5. 5: Confronto tra le due mappe di operabilità modellistiche e sperimentali.....	67
Grafico 5. 6: Confronto IMEP - Dati Sperimentali/Prove a 30°C	68
Grafico 5. 7: Confronto IMEP - Dati Sperimentali/Prove a 105°C.....	68
Grafico 5. 8: Confronto Inizio Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C	70
Grafico 5. 9: Confronto Durata Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C	70
Grafico 5. 10: Confronto Inizio Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C.....	71

Grafico 5. 11: Confronto Durata Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C.....	72
Grafico 5. 12: Confronto Inizio Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C.....	73
Grafico 5. 13: Confronto Durata Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C.....	74
Grafico 5. 14: Confronto Inizio Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C.....	74
Grafico 5. 15: Confronto Durata Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C.....	75
Grafico 5. 16: Confronto Calore Rilasciato Dati Sperimentali/Prove a 105°C....	76
Grafico 5. 17: Confronto Produzione di CO Dati Sperimentali/Prove a 30°C.....	77
Grafico 5. 18: Confronto Produzione di CO Dati Sperimentali/Prove a 105°C...	78

INTRODUZIONE

In questi ultimi decenni si sono intensificati gli sforzi per cercare di sviluppare dei motori per autoveicoli in grado di avere elevate performance, limitando però il consumo di combustibile e l'emissione di inquinanti. Tra le tante proposte, una di quelle maggiormente studiate è lo sviluppo dei cosiddetti motori a combustione omogenea (HCCI). Tale tecnologia però soffre di seri problemi di controllo, dovuti al fatto che il motore è interamente regolato dalla cinetica chimica. Diventa quindi necessaria una modellazione strettamente legata allo sviluppo di meccanismi cinetici.

In questo contesto si inserisce lavoro sviluppato durante il periodo di tesi, il cui obiettivo è stato quello di caratterizzare la combustione di n-eptano (scelto come rappresentate dei tipici combustibili per motori Diesel) in un motore HCCI utilizzando un modello multizona e un meccanismo cinetico dettagliato. I risultati modellistici sono stati confrontati con alcuni dati raccolti sperimentalmente da Z. Peng, H.Zhao, T. Ma e N. Ladommatos nel 2005 e riportati nell'articolo "Characteristics of Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) combustion and emissions of n-heptane" .

Per comprendere le condizioni di funzionamento del motore HCCI, sulla base dei dati raccolti è stata costruita la mappa di operabilità, ossia una mappa in cui vengono riportate le condizioni della miscela all'interno del cilindro in termini di rapporto aria-combustibile (λ) e quantità di gas di ricircolo (EGR%) che permettono un corretto funzionamento del motore.

Sono stati quindi analizzati gli effetti che λ e la quantità di EGR hanno sui limiti della mappa, sulle temperatura massima raggiunta nella camera di combustione, sulla pressione media effettiva indicata, sul calore rilasciato durante la combustione, sull'inizio e durata delle sue diverse fasi e sulla quantità di CO emessa dalla combustione.

Nel **Capitolo 1** viene presentata una panoramica sui motori a combustione interna, in cui si analizzano i loro limiti in termini energetici e ambientali e alcune delle soluzioni proposte per il loro miglioramento.

Nel **Capitolo 2** vengono introdotti i concetti fondamentali riguardo alla combustione omogenea, con i suoi vantaggi/svantaggi e i possibili sviluppi futuri.

Il **Capitolo 3**, invece, presenta i diversi approcci modellistici seguiti nella modellazione di questo tipo di motori e, in modo particolare, del modello multi-zona utilizzato in questo lavoro.

Il **Capitolo 4** riporta una descrizione semplificata del meccanismo cinetico implementato nel modello multi-zona per la caratterizzazione della combustione del n-eptano.

Nel **Capitolo 5** sono riportati i risultati ottenuti dalla modellazione del motore e il confronto tra i dati modellistici e quelli sperimentali.

Infine il **Capitolo 6** riporta le conclusioni del lavoro.

CAPITOLO 1

MOTORI A COMBUSTIONE INTERNA

I motori a combustione interna sono macchine motrici termiche, che si propongono di convertire in lavoro meccanico la parte più grande possibile dell'energia liberata bruciando combustibili entro la macchina stessa. (Ferrari, Motori a combustione interna, 2008).

Essi sono comunemente montati sulla maggioranza dei veicoli terrestri e in pratica forniscono lavoro all'albero attraverso la combustione discontinua di una miscela combustibile-comburente in una o più camere di lavoro, il cui volume viene fatto variare per mezzo del moto di stantuffi che scorrono all'interno di cilindri chiusi superiormente da una testata. L'energia liberata dalla combustione del fluido motore viene ceduta allo stantuffo il cui moto alterno viene poi convertito, attraverso un meccanismo biella-manovella, nel moto rotatorio dell'albero motore, che è l'organo da cui viene prelevato il lavoro prodotto. Il meccanismo descritto è illustrato in maniera semplificata in figura 1.1.

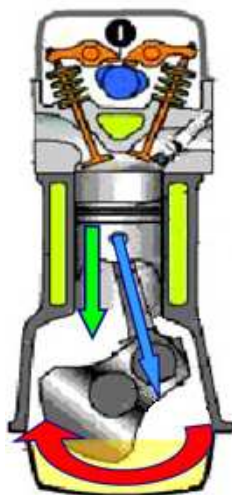


Figura 1. 1: Motore a combustione interna
Fonte: <http://www.biketrainer.it>

Essi furono il risultato di una lunga serie di studi, ricerche ed esperimenti che videro impegnati numerosi scienziati europei dalla metà dell' 800 fino ai primi anni del '900.

L'origine del motore a combustione interna risale appunto alla metà del XIX secolo, quando in diverse regioni europee iniziarono i primi esperimenti nel tentativo di produrre energia meccanica dal calore.

Dalla loro introduzione, i motori a combustione interna si sono evoluti molto in termini di aspetto, materiali e prestazioni, ma giocano lo stesso ruolo chiave, sia socialmente che economicamente, in quanto hanno permesso lo sviluppo del mondo moderno in cui poi le relazioni si sono estese a livello globale, grazie soprattutto allo sviluppo dei trasporti che hanno ridotto i tempi e avvicinato i luoghi.

I criteri di classificazione dei motori a combustione interna sono molteplici e sono basati sui i parametri che ne caratterizzano il funzionamento. Tra tutti i parametri quello che più interessa in questo caso è la modalità di avviamento della combustione del fluido di lavoro, secondo il quale i motori attualmente in uso si classificano in:

motori ad accensione comandata: motori in cui la miscela di aria e di vapori di benzina viene accesa da una scintilla fatta scoccare tra gli elettrodi di una candela, realizzando così una combustione molto rapida, idealmente a volume costante.

motori ad accensione spontanea : motori in cui il combustibile viene iniettato, finemente polverizzato, in seno all'aria calda e compressa, in modo da provocarne l'autoaccensione e dare origine ad una combustione più lenta e graduale, idealmente a pressione costante. (Ferrari, Motori a combustione interna, 2008)

1.3. MOTORI AD ACCENSIONE COMANDATA

In un motore a combustione comandata, detto anche comunemente motore a benzina, il carburante utilizzato è solita una benzina, costituita da idrocarburi C₆-C₈ che distillano tra i 20°C ed i 200°C.

In questo tipo di motore purché la miscela abbia una composizione opportuna e l'energia della scintilla superi il valore critico di accensione, la scarica elettrica che si realizza tra gli elettrodi della candela, attiva le molecole di un volumetto vicino fino a portarle ad un livello energetico, al quale le reazioni di ossidazione possono auto sostenersi, perché l'energia da esse rilasciata supera le perdite di calore attraverso le pareti metalliche ed il gas circostante. Lo sviluppo di questo primo nucleo di combustione è principalmente influenzato da temperatura, massa volumica e composizione della miscela, che condizionano la cinetica chimica delle reazioni.

L'intensità della turbolenza locale e la sua scala esercitano un peso minore, influenzando sulla direzione di propagazione e sulla sua eventuale estinzione.

Nella fase iniziale si può quindi ritenere che la fiamma sia laminare e si propaghi con velocità v_{cl} (relativamente bassa) alla miscela circostante. Occorre perciò un certo tempo, detto tempo di incubazione o sviluppo del fronte di fiamma (dove per fronte di fiamma si intende la zona in cui a causa del forte rilascio di energia, le temperature locali si portano a valori molto elevati, oltre i 2000°C , e quindi la regione in esame appare luminosa), per avere nel cilindro un percettibile aumento di pressione, rispetto al valore determinato dalla sola legge di moto del pistone.

Durate tale periodo di tempo la prima fiamma laminare si trasforma gradualmente in una turbolenta, diventando sempre più sensibile alle condizioni di moto della carica, dalle quali dipende il corrugamento ed il forte ripiegamento del fronte di reazione.

Man mano che l'area di quest'ultimo aumenta ulteriormente, la combustione raggiunge la sua seconda fase, in cui un fronte di reazione pienamente turbolento si propaga alla maggior parte della carica con velocità prossima ai suoi massimi valori. La struttura del fronte e la velocità di combustione turbolenta v_{ct} , dipendono principalmente dalle condizioni di moto della carica, che a loro volta variano soprattutto con il regime di rotazione del motore.

Dal momento in cui il fronte di fiamma raggiunge le pareti più lontane della camera di combustione (accendendo così tutta la miscela aria-combustibile), inizia la terza ed ultima fase di completamento della combustione. Le reazioni

chimiche continuano in prossimità delle pareti e dietro il fronte, finché i processi di ossidazione non sono completati. Durante questa fase, le velocità delle reazioni sono più basse che nel periodo precedente e tornano a dipendere più dalle proprietà fisiche e chimiche della miscela che dall'intensità dei moti turbolenti. (Ferrari, Motori a combustione interna, 2008)

1.4. MOTORI AD ACCENSIONE SPONTANEA

In un motore ad accensione spontanea, detto anche comunemente motore diesel, il combustibile utilizzato è solitamente un gasolio, cioè combustibile di media massa volumica (C_9 - C_{10}) che distilla tra i 180°C e i 360°C .

In motori di questo tipo il combustibile viene iniettato sotto forma di fine spray in quest'aria ad alta temperatura e pressione, poco prima che lo stantuffo raggiunga la posizione di punto morto superiore. Esso vaporizza e si mescola con l'aria, formando una miscela aria-combustibile, la quale, per il fatto di trovarsi a temperature e pressioni superiori a quelle di accensione del combustibile, dove il rapporto di miscela è prossimo allo stechiometrico, si accende spontaneamente dopo un ritardo dell'ordine del millisecondo.

Il conseguente aumento di pressione nel cilindro accelera le reazioni di preossidazione di quella parte di miscela aria-combustibile già formata, che si accende e brucia rapidamente portando la temperatura dei gas a valori superiori ai 2000°C e la pressione a 15-20 MPa. Di conseguenza, la vaporizzazione e la diffusione dei vapori del restante combustibile, ancora liquido, viene accelerata notevolmente. L'iniezione continua fino a quando la quantità di combustibile richiesta è stata introdotta nella camera, passando attraverso i vari processi di polverizzazione, vaporizzazione, diffusione e combustione. Infine, durante la fase di espansione, il mescolamento dell'aria rimasta nel cilindro con i gas combusti o parzialmente ossidati, porta al completamento della combustione. (Ferrari, Motori a combustione interna, 2008)

1.5. PROBLEMATICHE ANNESSE AI MOTORI A COMBUSTIONE INTERNA

Dalla nascita dei motori a combustione interna ad oggi la loro diffusione è stata radicale e ormai è impossibile fare a meno dei mezzi di trasporto a motore.

Negli ultimi decenni però l'uomo ha iniziato a fare i conti con gli impatti che queste tecnologie hanno sulle risorse energetiche e sulla qualità dell'aria che respiriamo.

Negli ultimi dieci anni però sempre più serie sono diventate le preoccupazioni in merito all'impatto ambientale delle emissioni di gas e particolato generate durante la fase di combustione in questi motori e, più recentemente, all'aumento delle emissioni di CO₂ a cui si imputano i cambiamenti climatici, soprattutto in Europa, le quali hanno dato seguito all'inasprimento della legislazione che ha il compito di gestire e contenere questo tipo di emissioni inquinanti e di conseguenza a forti tassazioni del trasporto su strada. In aggiunta a ciò, ulteriori preoccupazioni si hanno in merito alla drastica riduzione delle riserve mondiali di petrolio e al deciso aumento del suo costo in relazione a fatti storici, politici ed economici.

Questi fattori hanno alzato al massimo la pressione sulle case automobilistiche, in modo da spingerle ad accelerare la ricerca e lo sviluppo di nuove tecnologie più pulite ed efficienti.

1.5.1. PROBLEMATICHE ENERGETICHE

Per ragioni di facilità di trasporto e per l'alta densità energetica, circa il 98% dei combustibili usati attualmente per i motori del nostro paese, sono dei liquidi ricavati dalla distillazione del petrolio, la fonte energetica tuttora più conveniente. (Ferrari, Motori a combustione interna, 2008) In figura 1.2 viene con evidenza mostrato il netto divario tra il consumo di petrolio e quello di gas naturale e delle energie rinnovabili, principali fonti alternative, negli ultimi cinquant'anni.

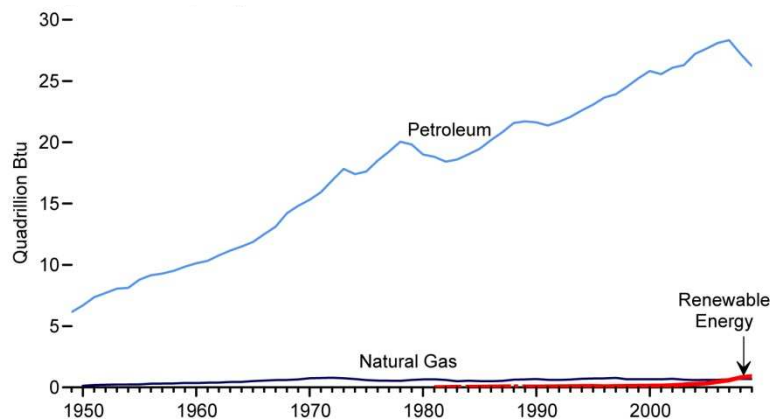


Figura 1. 2: Consumo di energia nel settore trasporti dal 1949 al 2009

Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information Administration

Il prezzo di un barile di petrolio ha sempre avuto un'evoluzione altalenante a seguito degli avvenimenti storici, come mostrato in figura 1.3.

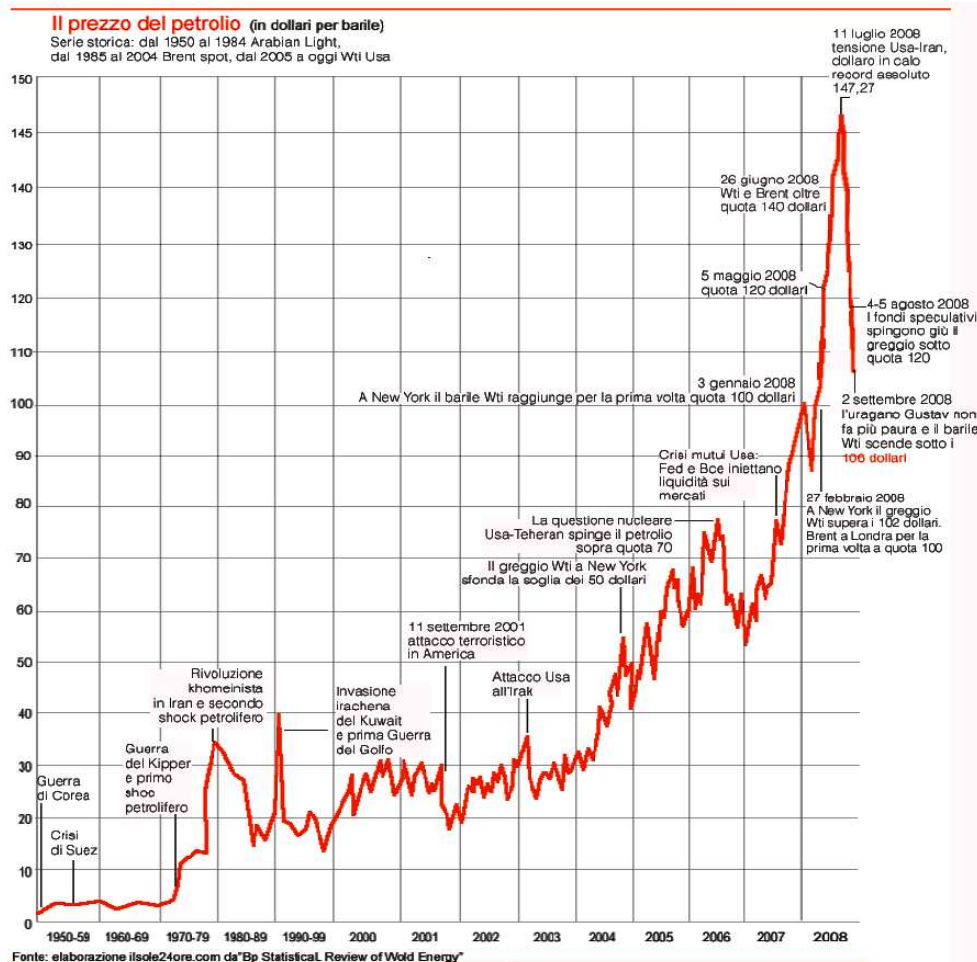


Figura 1. 3: Andamento del prezzo del petrolio dal 1950 al 2008
Fonte: BP Statistical Review of World Energy

Dopo l'estate 2008 la bolla speculativa si è sgonfiata rapidamente, per via della crisi economico-finanziaria globale e della grande recessione scoppiata in America con i mutui supprime, crisi ovviamente destinata a incidere sui consumi energetici in tutto il mondo. Il prezzo del greggio è crollato per poi risalire nel corso del 2009. Tra fine 2009 e primo trimestre 2010 il prezzo del greggio è salito di nuovo verso quota \$80 al barile ed attualmente è stabile intorno a questa cifra, mentre il mondo occidentale esce lentamente dalla grande recessione.

Inoltre in conseguenza delle crisi energetiche del 1973 e del 1979 si è sollevato l'interesse nella pubblica opinione sui livelli delle scorte di petrolio, portando alla luce la preoccupazione che, essendo il petrolio una risorsa limitata, essa sia destinata ad esaurirsi, almeno come risorsa economicamente sfruttabile. La figura 1.4 mostra come nonostante le riserve di petrolio stiano lentamente diminuendo dal 1977, la produzione sia costantemente in forte aumento.

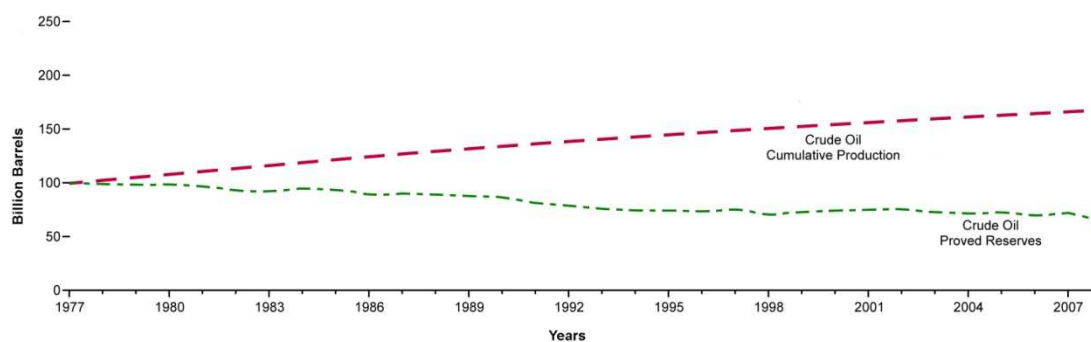


Figura 1. 4: Andamento della produzione e delle riserve provate di petrolio dal 1977 al 2008

Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information Administration

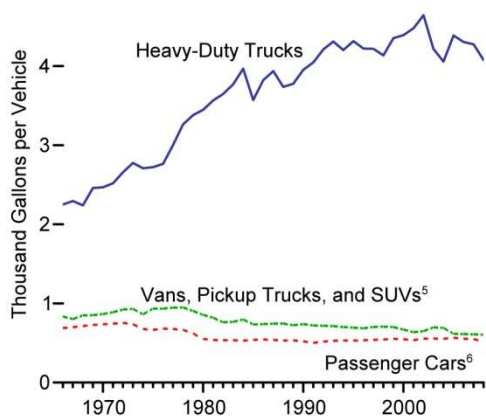


Figura 1. 6: Consumo di carburante per diverse categorie di veicoli
Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information Administration

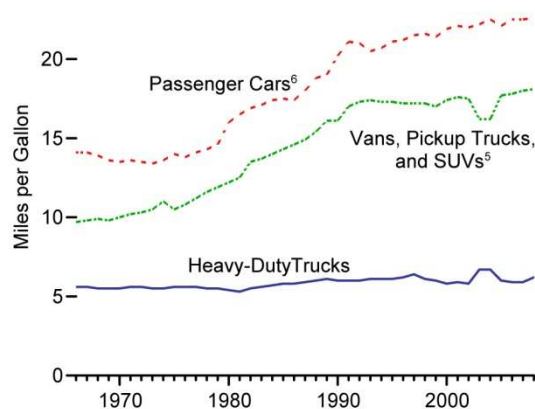


Figura 1. 5: Efficienza di consumo per diverse categorie di veicoli
Fonte: Annual Energy Review 2009 by u.s. Energy Information Administration

Dalle figure 1.5 e 1.6 è possibile osservare come il problema più grande riguardi i veicoli pesanti, che solitamente montano motore diesel, i quali arrivano a consumare circa 5 volte di più rispetto alle normali automobili e che presentano un'efficienza di consumo notevolmente inferiore e che poco si è evoluta nel lasso di tempo considerato.

1.5.2. PROBLEMATICHE AMBIENTALI

I motori montati su mezzi di trasporto costituiscono le principali sorgenti di inquinamento atmosferico nelle aree urbane ad intenso traffico, specie per quanto riguarda gli strati dell'aria più prossimi al terreno.

Le emissioni si possono sinteticamente dividere in tre categorie:

- **prodotti di combustione incompleta**, i quali sono tossici e capaci di produrre danni fisiologici diversi a seconda della loro composizione chimica. Di questa categoria fanno parte il **monossido di carbonio (CO)**, una grande varietà di idrocarburi gassosi (sinteticamente chiamati **HC**) e particelle solide portate in sospensione dai gas, anch'esse derivate dall'ossidazione incompleta del combustibile o da composti metallici ed additivi in esso presenti (**particolato atmosferico**);

- **prodotti di ossidazione completa di sostanze presenti nei combustibili o nell'aria:** sono nocivi per ogni forma di vita animale e vegetale. Si fa riferimento soprattutto agli **ossidi di azoto (monossido NO e biossido NO₂)** comunemente indicati come **NO_x**);
- **prodotti di ossidazione completa già presenti nell'atmosfera:** vengono alterati i cicli naturali di produzione e distruzione, contribuendo così a modificare il bilancio tra energia assorbita e quella irradiata dalla terra (effetto serra). A tal proposito si prende in considerazione in modo particolare l'**anidride carbonica CO₂**.

Per avere un'idea quantitativa di quanto il settore dei trasporti su strada incida sulle emissioni di inquinanti fare riferimento all' *APPENDICE A : "Dati relativi alle emissioni inquinanti nel settore trasporti"*.

Le cause che portano alla formazione degli inquinanti scaricati da un motore sono molteplici e complesse, per cui il loro controllo è molto difficile.

Il problema viene quindi normalmente attaccato su più fronti, in modo da conseguire diverse soluzioni parziali, che permettano di rispettare i limiti imposti dalle norme antinquinamento, con la minor complessità e il minor costo possibile.

Schematicamente si può ritenere che i vari interventi riguardino prevalentemente:

- i **combustibili**, la cui composizione può essere ottimizzata anche dal punto di vista della composizione dei gas scaricati;
- l'**alimentazione**, per assicurare le caratteristiche più opportune per la miscela aria/combustibile;
- il **processo di combustione**, in modo da accelerarlo e renderlo il più completo possibile;
- i **gas di scarico**, per depurarli dagli inquinanti ormai formati, attraverso un processo di **ossidazione e/o riduzione di tipo catalitico**.

Nei primi tre casi si tenta di impedire a monte la formazione delle sostanze nocive, agendo direttamente sui fenomeni che avvengono nel cilindro del motore; mentre nel quarto caso si cerca di eliminare a valle i costituenti dei gas di scarico non tollerati, con un processo post-trattamento dei gas.

L'Unione Europea, a partire dal 1991, ha emanato una serie di direttive finalizzate a limitare la nocività dei carburanti e promuovere la realizzazione di veicoli sempre meno inquinanti. Si tratta di una serie di standard, identificati con la sigla Euro- seguita da un numero, dalle caratteristiche sempre più restrittive, che riguardano le emissioni dei veicoli, misurate in g/kWh per i veicoli commerciali pesanti e in g/km per gli altri veicoli, in base alle quali sono state individuate cinque categorie di appartenenza dei veicoli:

- **Euro 0:** indica i veicoli "non catalizzati" a benzina e i veicoli "non ecodiesel";
- **Euro 1:** introdotto nel 1992, limita le emissioni per le auto a 8 g/kWh di NOx e, per le sole vetture diesel, 0.36 g/kWh di polveri fini (non vengono stabiliti limiti di emissione per le vetture a benzina poiché la combustione di tale carburante ne produce in quantità minima). Ha inoltre introdotto l'obbligo per la casa costruttrice di montare la marmitta catalitica e di usare l'alimentazione a iniezione.

Sono Euro 1 tutti i veicoli a benzina immatricolati dopo il 1° gennaio 1993, poiché per legge devono rispettare le norme di seguito riportate. Sono Euro 1 i veicoli a benzina immatricolati prima del 1° gennaio 1993 se rispettano una delle seguenti norme:

83/351 CE rif. 91/441 CE

88/77 CE rif. 91/441 CE

88/436 CE rif. 91/441 CE

89/458 CE

91/441 CE

91/542 CE punto 6.2.1.A

93/59 CEE con catalizzatore

- **Euro 2:** introdotto nel 1995, limita le emissioni per le auto a 7 g/kWh di NOx e, per le sole vetture diesel, 0.15 g/kWh di polveri fini (non vengono stabiliti limiti di emissione per le vetture a benzina poiché la combustione di tale carburante ne produce in quantità minima). Sono Euro 2 i veicoli immatricolati dopo il 1° gennaio 1997 che rispettano una delle seguenti norme:
 - 94/12 CE
 - 96/1 CE
 - 96/44 CE
 - 96/69 CE
 - 98/77 CE
 - 91/542 punto 6.2.1.B

- **Euro 3:** introdotto nel 1999, limita le emissioni del diesel a 0.5 g/km di NOx e di 0.05 g/km di polveri fini (PM). Per le auto a benzina i limiti sono posti a 0.15 g/km NOx (non vengono stabiliti limiti di emissione di polveri per le vetture a benzina poiché la combustione di tale carburante ne produce in quantità minima). Per i mezzi pesanti a 5 g/kWh di NOx e 0.1 g/kWh di PM. Sono Euro 3 i veicoli immatricolati dopo il 1° gennaio 2001 che rispettano una delle seguenti norme:
 - 98/69 CE
 - 98/77 CE rif 98/69 CE
 - 99/96 CE
 - 99/102 CE rif. 98/69 CE
 - 2001/1 CE rif. 98/69 CE
 - 2001/27 CE
 - 2001/100 CE fase A
 - 2002/80 CE fase A
 - 2003/76 CE fase A

- **Euro 4:** introdotto nel 2005, limita le emissioni per le auto diesel a 0,25 g/km di NOx e a 0,025 g/km di polveri fini (PM10). Per le auto a benzina i limiti sono posti a 0,08 g/km NOx (non vengono stabiliti limiti di emissione polveri per le vetture a benzina poiché la combustione di tale carburante ne

produce in quantità minima). Per i mezzi pesanti a 3,5 g/km di NOx e 0,02 g/km di PM. Anche se nessuna tecnologia specifica è incaricata di soddisfare i requisiti, le riduzioni delle emissioni sono tipicamente ottenute attraverso l'uso delle tecnologie di riduzione selettiva catalitica (SCR) o di ricircolo dei gas esausti (EGR). Sono Euro 4 i veicoli immatricolati dopo il 1° gennaio 2005, qualora rispettino una delle seguenti norme (solo se la direttiva di riferimento riporta la lettera B):

98/69/CE B

98/77/CE rif. 98/69/CE B

1999/96 CE B

1999/102 CE B rif. 98/69/CE B

2001/1 CE

2001/100 CE B

2002/80 CE B

2003/76 CE B

2005/55/CE B1

2006/51/CE rif. 2005/55/CE B1

- **Euro 5:** introdotto nel 2008 prevede i seguenti limiti per i veicoli privati:
 - Monossido di carbonio (CO): 1000 mg/km motori benzina e 500 mg/km per i motori diesel;
 - Idrocarburi totali (Total HydroCarbon - THC): 100 mg/km per i motori benzina;
 - Idrocarburi non metanici (NMHC): 68 mg/km per i motori benzina;
 - Ossidi di azoto (NOx): 60 mg/km per i motori benzina e 180 mg per i diesel;
 - Idrocarburi totali più ossidi di azoto: 230 mg/km motori diesel;
 - Particolato (MP): 5 mg/km per entrambi i tipi di motore (-80% rispetto a Euro IV);

Ai veicoli superiori a 2.500 kg per il trasporto dei disabili ed altre utilità sociali, le norme si applicheranno a partire da settembre 2010. Sono Euro 5 i veicoli immatricolati dopo il 1° settembre 2009, qualora rispettino una delle seguenti norme:

1999/96/CE Riga B2

1999/96/CE Riga C (ECOL. MIGLIORATO)

- 2001/27/CE RIF 1999/96/CE Riga B2
- 2001/27/CE RIF 1999/96/CE Riga C (ECOL. MIGLIORATO)
- 2005/79/CE RIF 2005/55/CE Riga B2 (Euro 5)
- 2005/79/CE RIF 2005/55/CE Riga C (ECOL. MIGL.)
- 2006/51/CE RIF 2005/55/CE Riga B2 (Euro 5)
- 2006/51/CE RIF 2005/55/CE Riga C (ECOL. MIGL.)

Nelle figure 1.7 e 1.8 sono schematizzati i limiti di emissione delle principali sostanze inquinanti per motori a benzina e a gasolio. Risulta evidente la drastica riduzione dovuta alle normative dal 1992 fino all'introduzione dell' EURO 5.

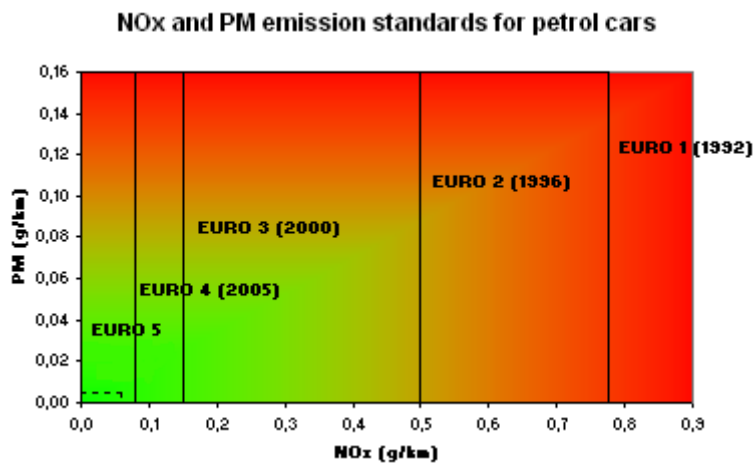


Figura 1. 7: Limite delle emissioni per autoveicoli leggeri a benzina
 Fonte: <http://www.dieselnet.com/standards/eu/ld.html>

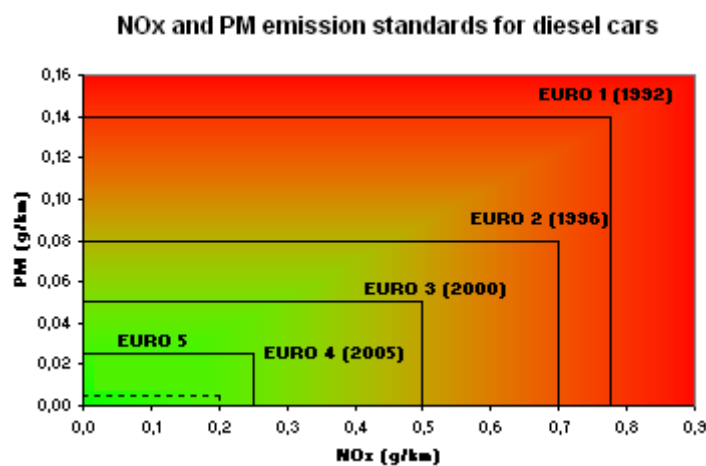


Figura 1. 8: Limite delle emissioni per autoveicoli leggeri a gasolio
 Fonte: <http://www.dieselnet.com/standards/eu/ld.html>

- **Euro 6:** verrà introdotto a partire dal 2014 e limiterà le emissioni secondo schemi in fase di compilazione; alcuni parametri di riduzione percentuale di massima, per particolato, ossidi di azoto e THC sono già stati previsti: riduzione fino a 80 mg gli ossidi di azoto e fino a 170 mg quelle di THC e di ossidi di azoto da parte dei diesel.

Con l'entrata in vigore della normativa Euro 6 le differenze fra i limiti di emissione dei diesel e benzina saranno pressoché equiparate.

E' evidente quindi che la prospettiva di avere veicoli a emissioni prossime allo zero con performance elevate diventerà presto una realtà.

Teoricamente già esiste una tecnologia in grado di produrre realmente zero emissioni, si tratta delle **Fuel Cell**, ossia un dispositivo elettrochimico che permette di ottenere elettricità direttamente da certe sostanze, tipicamente da idrogeno ed ossigeno, senza che avvenga alcun processo di combustione termica. Uno schema di funzionamento semplificato è rappresentato in figura 1.9. Il loro rendimento sui veicoli di trasporto però attualmente non supera il 30% a fronte di elevatissimi costi dovuti al fatto che il sistema di produzione attualmente seguito è fondamentalmente di tipo artigianale e su ordinazione.

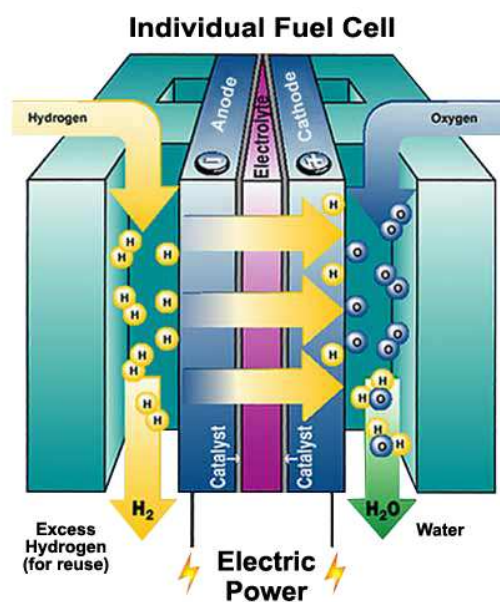


Figura 1. 9: Schema di funzionamento di una fuel cell
 Fonte: <http://tylerdoesscience.blogs.um.edu/>

Per queste ragioni si considera importante lo sviluppo dei veicoli ibridi di tipo elettrico, ma non a breve termine.

Attualmente quindi gli sforzi della ricerca si stanno concentrando soprattutto nello sviluppo dei motori a combustione interna esistenti, con l'introduzione di tecnologie volte a migliorare le prestazioni con una contemporanea riduzione delle emissioni.

Tra queste tecnologie le principali per i motori ad accensione comandata sono:

- **Convertitori catalitici trivalenti (TWC).** Essi svolgono una triplice azione su gas di scarico derivanti da un'alimentazione prossima alla stechiometria, essendo capaci di ridurre contemporaneamente gli NO_x a N_2 e di ossidare gli HC a CO, CO_2 e H_2O . Per rendere massima la loro efficienza, occorre avere una grande area esposta al flusso dei gas. Questi vengono guidati da un involucro metallico attraverso i canali di un elemento cilindrico monolitico in materiale ceramico, avente forma di un nido d'ape, così come evidenziato in figura 1.10. I canali di passaggio sono rivestiti da uno strato poroso di allumina, impregnato di catalizzatore (metalli nobili);



Figura 1. 10: Principio di funzionamento della marmitta catalitica
Fonte:<http://it.wikipedia.org>

- **Motori lean burn o a carica stratificata.** L'intenzione è di ridurre la dispersione uniforme della benzina nella camera di combustione, studiando soluzioni atte a tenere il più possibile ravvicinati i corpuscoli di combustibile, con l'obiettivo di realizzare, in prossimità della candela, proporzioni di aria e benzina vicine al rapporto stechiometrico: un po' come creare tante piccole "isole" di miscela a rapporto stechiometrico. Al di fuori di queste zone i vapori di benzina sono più rarefatti rispetto all'aria e la loro accensione può

avvenire solo a seguito dell'avvio della combustione nelle varie isole stechiometriche presenti attorno alla candela;

- **Sistema di ignizione diretta.** I vantaggi derivanti dall'impiego dello schema di iniezione diretta sono notevoli: la benzina viene spruzzata direttamente nella camera di combustione e ciò raffredda l'aria più di quanto non avvenga nei propulsori tradizionali, in cui gli abbassamenti di temperatura interessano soprattutto i collettori di aspirazione. La carica entrante si raffredda aumentando la densità dell'aria che, a sua volta, incrementa il grado di riempimento del motore a tutto vantaggio delle prestazioni. L'iniezione diretta, inoltre, dà la possibilità di aumentare il rapporto di compressione del motore, in quanto la ridotta temperatura della camera di combustione allontana il rischio di detonazione, il cosiddetto "battito in testa". Tutto ciò si traduce in un incremento della pressione media effettiva del motore pari a circa il 10%, con conseguente riduzione dei consumi del 4-5% che tendono a diventare più significativi se, all'iniezione diretta in camera, si unisce l'adozione della combustione magra lean burn menzionata in precedenza.

In definitiva, l'iniezione diretta è in grado di garantire maggiore potenza, minori consumi e una maggiore prontezza di risposta del motore, anche se non mancano alcuni svantaggi come la mancanza di completa miscela che porta alla produzione di particolato ultrafine.

Mentre per i motori ad accensione spontanea:

- **Sistema Common Rail.** All'interno di questo innovativo sistema di iniezione la generazione della pressione di iniezione e l'iniezione sono disaccoppiate. La pressione di iniezione, generata nell'accumulatore ad alta pressione (rail e linee ad alta pressione che portano ai polverizzatori) da una pompa che opera sotto basse coppie, è indipendente dalla velocità di rotazione del motore; a monte del polverizzatore la pressione di iniezione è costante e molto elevata. Sia l'inizio sia la durata dell'iniezione e, di conseguenza, la quantità iniettata possono essere variate in modo flessibile mediante l'elettroiniettore con servovalvola di controllo.

Oltre alla scelta della pressione del sistema, è possibile modellare la legge di iniezione mediante il controllo del movimento della spina dell'iniettore; quando necessario, comandi ripetuti dell'elettrovalvola consentono di effettuare sia l'iniezione pilota sia iniezioni multiple (Common Rail di seconda generazione). Superati gli iniziali problemi dovuti alle difficoltà di controllo dell'alzata dello spillo iniettore e alle ristrettissime tolleranze di lavoro richieste, oggi un tale sistema di iniezione permette una migliore nebulizzazione del combustibile che può così venire intimamente miscelato con l'aria inviata nel cilindro, portando a sensibili miglioramenti in termini di rendimento ed emissioni inquinanti, oltre a una drastica riduzione del rumore tipico del diesel dovuto al caratteristico ritardo all'accensione della miscela.

- **Sistema di riduzione catalitica selettiva (SCR).** Efficace tecnologia messa a punto inizialmente per i Diesel per impianti stazionari e che si sta cercando di estendere a quelli per i mezzi di trasporto, che punta alla riduzione degli ossidi di azoto per mezzo dell'ammoniaca. Poiché l'ammoniaca è tossica, in pratica si trova più conveniente utilizzare l'urea. Come illustrato in figura 1.11, in un primo elemento del convertitore questa si trasforma in ammoniaca e CO₂ per idrolisi e termolisi. Successivamente l'ammoniaca si combina per catalisi con l'ossigeno degli NO_x, riducendo ad N₂. A valle di questi due elementi conviene poi aggiungere una parte ossidante, in cui l'eventuale ammoniaca in eccesso viene ossidata ad acqua e azoto. La tecnologia SCR viene proposta come la più efficace e conveniente per rimuovere gli NO_x dai gas di scarico, specialmente nei casi di veicoli industriali presenti ed autobus.

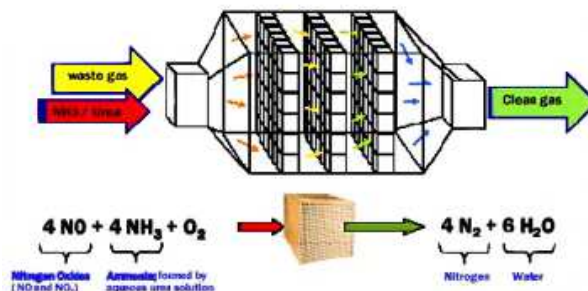


Figura 1. 11: Principio di funzionamento del sistema di riduzione catalitica selettiva
 Fonte: <http://www.airprotech.eu/denox.php>

- **Filtri anti-particolato.** Sono costituiti essenzialmente da un componente che costringe i gas combusti a passare attraverso una barriera porosa. Le particelle di dimensioni superiori a quelle dei pori sono trattenute, mentre i composti gassosi attraversano la parete filtrante. Gli agglomerati carboniosi si accumulano così sulla superficie filtrante, che deve essere periodicamente pulita, ossidando i depositi ammassati. La struttura è ben schematizzata in figura 1.12. Poiché questi filtri devono essere in grado di sopportare elevate temperature, sono generalmente realizzati in materiale ceramico con una struttura monolitica a nido d'ape.

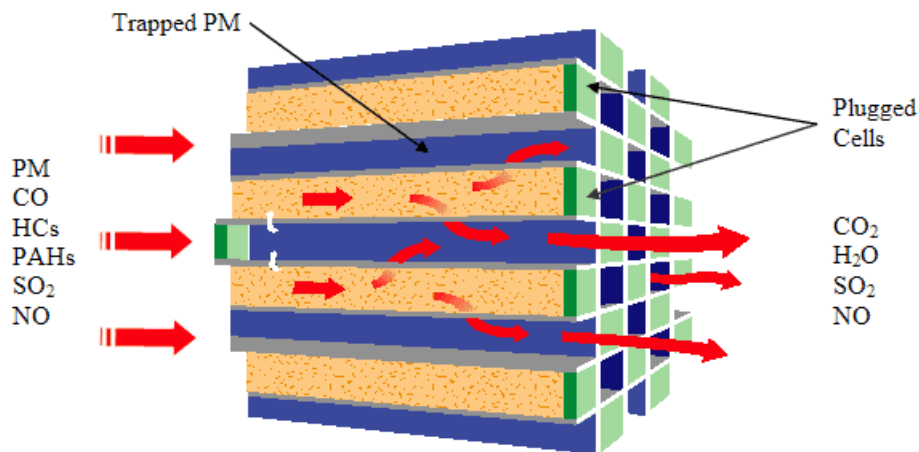


Figura 1. 12: Schema di un filtro anti-particolato
Fonte: <http://bznotes.wordpress.com/2007/01/>

Allo sviluppo delle tecnologie esistenti, da circa un decennio si è affiancata l'ideazione di sistemi di combustione alternativi, tra cui la cosiddetta **Combustione HCCI**, acronimo inglese di Homogeneous Charge Compression Ignition.

Essa è oggetto di questo lavoro e verrà ampiamente descritta in seguito.

CAPITOLO 2

COMBUSTIONE HCCI

La necessità di individuare tipologie di motori per autotrazione che possano garantire al contempo elevate prestazioni ed emissioni quanto più contenute possibili di inquinanti, in particolar modo ossidi di azoto e particolato, sta portando da alcuni decenni le case produttrici e gli enti di ricerca a studiare processi di combustione che possano avvicinarsi agli obiettivi prefissati. La combustione HCCI (acronimo anglosassone per Homogeneous Charge Compression Ignition - Accensione per Compressione di una Carica Omogenea) è una delle alternative tecnologicamente più interessanti ai comuni motori a combustione interna.

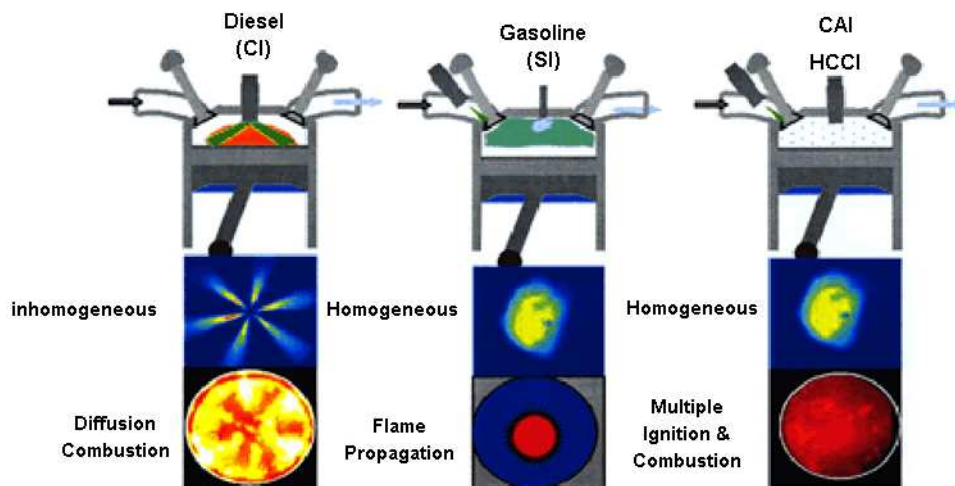


Figura 2. 1: Confronto tra i diversi tipi di motori a combustione interna *Fonte: (Zhao, 2007)*

La combustione HCCI è un processo nel quale una miscela omogenea di aria e combustibile si auto accende per compressione. L'innesco avviene, come nel caso della combustione per accensione spontanea, una volta superata la temperatura minima di autoaccensione per un tempo superiore a quello di latenza. Tuttavia, diversamente da quanto accade nei motori Diesel, le reazioni procedono con gradualità grazie ad opportuni accorgimenti quali, ad esempio, la forte diluizione della carica con gas combusti (EGR) o l'uso di un elevato

rapporto aria-combustibile. Un confronto diretto tra le diverse tipologie di motori è illustrato dalla figura 2.1.

In generale, valutando le principali caratteristiche del motore HCCI a confronto con i motori tradizionali Otto e Diesel, per esso si possono elencare i seguenti **vantaggi**:

- Alti rendimenti termodinamici dovuti ad una combustione molto rapida (che si avvicina alla condizione ideale di combustione a volume costante) ed all'uso di una miscela combustibile molto magra.
- La regolazione del carico è ottenuta (come nel Diesel tradizionale) variando la quantità di combustibile iniettato, senza strozzare il collettore di aspirazione. Non essendovi perdite di pompaggio, il rendimento si mantiene buono anche ai carichi molto parzializzati.
- Il combustibile ξ (come nel motore Otto tradizionale) brucia dopo essere stato premiscelato con l'ossidante, per cui si evita la formazione di particolato.

Per contro esso presenta i seguenti **svantaggi**:

- E' più difficile da regolare perché solo una complessa cinetica chimica controlla l'istante ed i punti della carica in cui avviene l'autoaccensione.
- La potenza massima ottenibile è limitata da un rilascio di energia (e quindi un aumento di pressione) così rapido che occorre contenere il rapporto di equivalenza per evitare forme di detonazione pericolose per l'integrità del motore.
- Si formano prodotti di ossidazione incompleta del combustibile (CO e HC). Questo deriva dal fatto che, essendo la carica omogeneamente distribuita nella camera di combustione, una porzione significativa del combustibile introdotto si deposita negli interstizi tra il cilindro e il pistone durante la fase di compressione e non prende parte alla combustione. A differenza dei motori ad accensione comandata, le temperature dei gas sono troppo basse per riuscire a bruciare la maggior parte di questo combustibile quando esso rientra nel cilindro durante la fase di espansione e, sempre le basse

temperature, possono portare ad una riduzione dell'efficienza del sistema di post-trattamento dei gas di scarico.

Un altro problema fondamentale da risolvere è l'estensione del campo di funzionamento della combustione HCCI a tutte le condizioni operative del motore, o almeno a gran parte di esse. A bassi carichi o non c'è sufficiente energia per l'autoaccensione o, alzando i rapporti di compressione per accendere comunque la carica, il problema è la scarsità dei gas combusti come moderatori. A carichi elevati invece, al fine di avere una sufficiente diluizione della carica per moderare la combustione, c'è bisogno di molta EGR, ma ciò ovviamente va a sfavore della potenza ottenibile (Ferrari, Motori a combustione interna, 2008).

La capacità di ottenere l'autocombustione controllata a bassi carichi e il graduale rilascio del calore agli alti, saranno quindi gli obiettivi da raggiungere per un positivo sviluppo del motore combustione HCCI.

L'ottenimento della combustione HCCI è possibile sia utilizzando benzine, sia con gasoli.

2.1. BACKGROUND STORICO

I primi ad investigare in merito all'innovativo processo di combustione furono Onishi (Onishi S., 1979) e Noguchi (Noguchi M., 1979), ma le radici pratiche e teoriche della combustione HCCI sono attribuite allo scienziato russo Nikolai Semenov e ai suoi colleghi che iniziarono ad occuparsi di queste tematiche già negli anni '30. Avendo elaborato una teoria riguardante il processo di ignizione, Semenov cercò di sfruttarla per superare le limitazioni dovute al controllo chimico-cinetico che dominano i processi di combustione all'interno dei motori a combustione interna. Egli osservò che applicando alla carica presente nel cilindro condizioni termodinamiche e chimiche simili a quelle delle fiamme fredde generate da miscele aria-idrocarburi, il processo di rilascio di calore risultava più uniforme. Su queste basi Gussak elaborò il primo motore a

combustione controllata utilizzando la tecnologia LAG (Avalanche Activated Combustion) (Gussak & altri, 1975).

Successivamente una serie di studi sono stati fatti in diverse parti del mondo per migliorare questa tecnologia, ma solo intorno a metà degli anni '90, con lo sviluppo di nuove tecnologie, si è iniziato a raggiungere risultati sostanziali in merito alla riduzione dei consumi e delle emissioni.

La Honda fu una delle prime case a credere in questi progetti e sviluppò il primo motore nel 1997, dichiarando di riuscire a ridurre i consumi di combustibile del 29% e dimezzare le emissioni di incombusti (Honda, 1997).

2.2. ELEMENTI FONDAMENTALI DELLA COMBUSTIONE HCCI

La combustione HCCI si basa sul fatto che la miscela deve essere la più omogenea possibile, deve accendersi per auto ignizione e svilupparsi in maniera controllata.

2.2.1. CREAZIONE CARICA OMOGENEA

Le principali soluzioni adottate per la creazione della carica omogenea sono:

– Premiscelazione

Questo approccio è forse quello più semplice e diretto per ottenere una carica omogenea. Il combustibile viene iniettato nel condotto a monte della valvola di aspirazione, in maniera simile ad un motore convenzionale ad accensione comandata ad iniezione diretta. E' necessario un preriscaldamento dell'aria aspirata al fine di minimizzare l'accumulo di combustibile sulle pareti del condotto e favorire l'evaporazione.

In generale, con questa soluzione, è necessario ridurre il rapporto di compressione a valori intorno a 8 – 13:1, a seconda della temperatura e della quantità di EGR, per non avere un'accensione troppo anticipata e detonazione. In condizioni non ottimali si ha un peggioramento delle

emissioni di particolato, poiché l'evaporazione del combustibile non è sufficientemente rapida e la combustione investe delle gocce ancora troppo grosse. Questo determina anche un aumento degli HC, che in certi casi possono essere molto elevati. I livelli di NOx risultano drasticamente ridotti (circa due ordini di grandezza inferiori rispetto a un Diesel convenzionale) ed in condizioni di funzionamento ottimale anche il particolato è ridotto a livelli molto bassi (Gray A.W., 1997).

– **Iniezione diretta anticipata**

Questa soluzione è forse quella più studiata nel campo della combustione HCCI. Rispetto alla premiscelazione nel condotto di aspirazione infatti, iniettando il combustibile durante la corsa del pistone, le maggiori temperature e la maggiore densità all'interno del cilindro possono favorirne la vaporizzazione e il mescolamento; questo permette di avere minori temperature dell'aria aspirata e quindi una minore propensione all'autoaccensione anticipata.

Con un'attenta progettazione dell'iniettore poi si può minimizzare l'accumulo di combustibile sulle pareti del cilindro che causa inefficienza di combustibile e diluizione dell'olio lubrificante (Kaneko N., 2002) (Agakawa H., 1999).

Lo svantaggio principale dell'iniezione diretta rispetto alla premiscelazione è che c'è meno tempo a disposizione per miscelare aria e combustibile e quindi i livelli di particolato e NOx possono essere più elevati se la carica non è sufficientemente omogenea.

– **Iniezione diretta ritardata**

La tecnica dell'iniezione diretta ritardata, sviluppata dalla Nissan Motor Company, è conosciuta anche col nome di MK (Modulated Kinetics). Un motore con questo sistema è stato prodotto nel 1998 per il mercato giapponese; il campo di funzionamento in modalità MK è limitato a bassi carichi e velocità. Per ottenere una carica omogenea e diluita, necessaria al funzionamento HCCI, tutto il combustibile deve essere iniettato e ben mescolato con i gas presenti nel cilindro prima dell'autoaccensione. Per questo motivo sono necessari un lungo ritardo di accensione e un rapido mescolamento. L'iniezione avviene 3° dopo il PMS e si fa uso di elevati

livelli di EGR, sufficienti a ridurre la concentrazione di ossigeno del 15-16%. Quindi in esso si osserva una sostanziale riduzione delle emissioni di NOx senza un aumento del particolato. Anche il rumore di combustione viene ridotto rispetto ad un Diesel convenzionale, e il rendimento termico è superiore e ciò deriva da un minore scambio termico con le pareti (Mase Y., 1998) (Kimura S., 199-01-3681).

– **Stratificazione omogenea della carica**

L'idea è quella di ridurre la dispersione del combustibile nella camera di combustione, creando tante piccole "isole" di miscela a rapporto stechiometrico. Al di fuori di queste zone i vapori di combustibile sono più rarefatti rispetto all'aria e la loro accensione può avvenire solo a seguito dell'avvio della combustione nelle varie isole stechiometriche. Le zone a miscela stechiometrica sono tanto piccole da evitare la formazione di particolato e di picchi di temperatura, per cui l'obiettivo della combustione HCCI è comunque rispettato (Zhao, 2007).

2.2.2. AUTOIGNIZIONE

In un miscela aria/combustibile si determina l'accensione spontanea (o auto ignizione) quando, in assenza di scambi di energia con l'esterno, si verifica una brusca accelerazione delle reazioni di ossidazione.

All'aumento di velocità di ossidazione si associa un aumento di temperatura della miscela e il processo culmina con l'apparizione della fiamma.

L'autoaccensione è il risultato di reazioni prefiamma che liberano calore fornendo una serie di prodotti instabili di parziale ossidazione. Queste reazioni portano all'avvio del processo di combustione senza l'intervento di una sorgente di accensione esterna. Questa condizione si verifica quando l'energia rilasciata dalle prime reazioni chimiche supera la quantità di calore ceduta dal sistema reagente all'ambiente esterno. Come conseguenza la temperatura della miscela aumenta accelerando rapidamente le varie reazioni di ossidazione la cui velocità dipende essenzialmente dalla temperatura. L'intervallo di tempo che passa tra l'istante in cui la miscela è portata in prefissate condizioni di pressione e

temperatura ed il momento in cui la combustione si avvia in modo apprezzabile è chiamato ritardo di accensione o periodo di induzione (τ)

Se la miscela non è omogenea intervengono fattori fisici come il movimento del fluido che controlla il reciproco miscelamento e la polverizzazione ed evaporazione della fase liquida eventualmente presente.

A parità di condizioni di scambio termico il ritardo si può ritenere inversamente proporzionale alla velocità con cui procedono le reazioni di ossidazione.

Nei motori a combustione interna il ritardo di accensione è dell'ordine dei ms. Per valutarlo occorre portare la miscela alla temperatura e pressione voluta in tempi trascurabili rispetto al ritardo da rilevare in macchine a compressione rapida.

Come origine per la misura del ritardo si prende l'istante t_a in cui il rapido moto del pistone ha portato la miscela in esame alla temperatura e alla pressione p_0 voluta. L'autoaccensione si realizza al tempo t_b con un brusco aumento di pressione seguito da rapide oscillazioni, per cui $\tau = t_a - t_b$.

Quando la temperatura non è molto alta l'autoaccensione degli idrocarburi avviene in due stadi:

1. fiamma fredda: si ha un aumento di pressione di entità modesta accompagnato da un incremento di temperatura di qualche decina o centinaio gradi comunemente accompagnato dalla emissione di una debole luce blu dovuto allo stato di eccitamento della formaldeide.
2. fiamma a più alta temperatura: si ha una rapida accelerazione delle reazioni di ossidazione con un forte rilascio di calore ed emissione di luce.

In figura 2.2 sono illustrati gli andamenti della pressione nel caso di accensione ad uno e a due stadi.

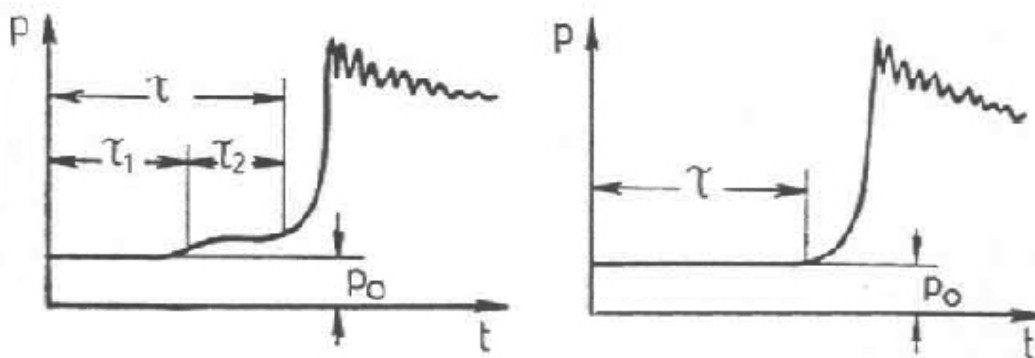


Figura 2. 2: Andamento della pressione in funzione del tempo nel caso di autoaccensione a due stadi (a) e a stadio singolo (b) Fonte: <http://teresa.donateo.unisalento.it>

In questo caso il ritardo è la somma dei due ritardi parziali sui quali le condizioni di temperatura e pressione della miscela possono esercitare una influenza diversa a seconda della natura del combustibile e dei campi di temperatura e pressione considerati.

L'accensione in due stadi sono spiegate a livello di cinetica chimica supponendo che durante il tempo di induzione si formino dei composti intermedi di parziale ossidazione del combustibile i quali risultano instabili ma di vita relativamente lunga.

A seconda dei livelli di temperatura e della natura dell'idrocarburo possono reagire sia per formare molecole stabili sia per produrre radicali attivi in grado di innescare le reazioni di ossidazione che portano all'autoaccensione. Al crescere della temperatura si assiste normalmente al passaggio dall'accensione in due stadi a quella in un singolo stadio.

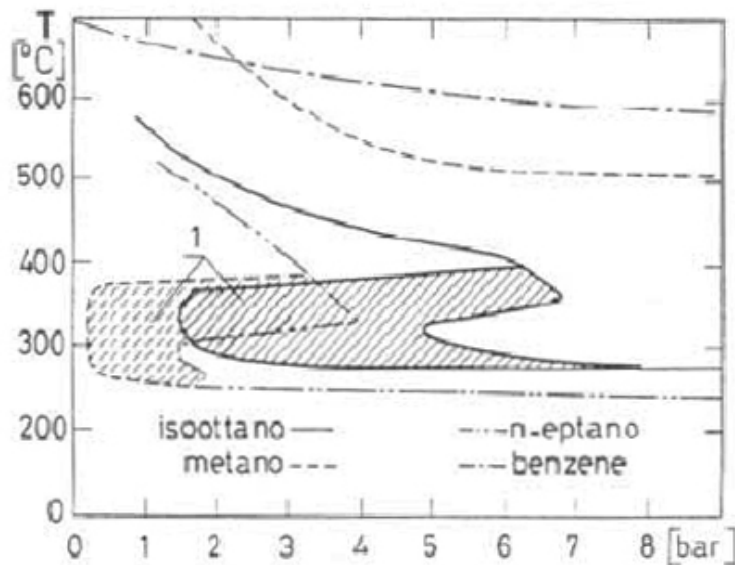


Figura 2. 3: Andamento della temperatura di accensione in funzione della pressione per idrocarburi differenti
Fonte: <http://teresa.donateo.unisalento.it>

Nella figura 2.3 sono messe in evidenza gli andamenti della temperatura di accensione in funzione della pressione per alcuni idrocarburi tipici utilizzati nei motori a combustione interna. Con il numero 1 sono indicate le zone di formazione delle fiamme fredde per quegli idrocarburi come l'isottano e il n-eptano che presentano un'accensione a due stadi.

2.2.3. CONTROLLO DELLA COMBUSTIONE HCCI

La combustione HCCI, a differenza dei sistemi tradizionali, è un processo che non si innesca in un punto ben preciso all'interno della camera di combustione ma ha luogo in molteplici punti coinvolgendo, in modo più o meno omogeneo, tutta la carica presente in camera; il processo si svolge così molto più rapidamente.

Il massimo rendimento termico si ottiene quando la fase della combustione avviene all'interno di una piccola finestra di gradi di albero di manovella nella quale la somma delle perdite di calore verso le pareti e dell'entalpia dei gas di scarico raggiunge un minimo. Il picco di pressione dovrebbe trovarsi tra gli 8 e i 12 gradi dopo il PMS e, data la brevità della combustione, anche piccoli

scostamenti dalla fasatura ideale possono causare una drastica diminuzione del rendimento

Tuttavia ad oggi non esiste un modo diretto di controllare l'innesco della combustione HCCI, ma quello che si riesce a fare è una sorta di controllo indiretto, ottenuto attraverso una progettazione e regolazione del motore tale da garantire le condizioni di buon innesco in un certo campo di funzionamento. Al di fuori di tale campo e durante i rapidi transitori le condizioni variano troppo velocemente e non è disponibile tenere sotto controllo tutti i parametri necessari a garantire una corretta combustione.

Il controllo della temperatura è fondamentale, ma essa varia in maniera significativa da ciclo a ciclo a causa degli elevati scambi termici tra la carica e le pareti, che a loro volta dipendono dalle condizioni operative del motore.

Ai bassi carichi ci sono problemi di accensione poiché i gas residui non hanno l'energia sufficiente per garantire l'innesco della combustione e si ricorre al riscaldamento dell'aria aspirata o all'utilizzo di un robusto EGR per aumentare la temperatura della carica.

Ai carichi intermedi i gas residui hanno l'energia necessaria per l'accensione e l'EGR è comunque indispensabile per modulare la combustione.

Agli alti carichi invece le condizioni sono proibitive: servirebbe troppa EGR, e quindi una pressione di sovralimentazione eccessiva per modulare la combustione.

Poiché non si è ancora riusciti a far convivere tutte queste esigenze, un funzionamento stabile in modalità HCCI al variare del carico e del regime di rotazione non è ancora possibile.

Alcuni parametri fondamentali per l'ottenimento e il controllo della combustione HCCI, sono:

– **Temperatura dell'aria aspirata**

Questo parametro è quello maggiormente studiato per il controllo della combustione HCCI: una temperatura maggiore riduce il ritardo di accensione e determina una combustione anticipata, ma il campo di

controllabilità è relativamente limitato. Al di sopra di questo campo il rendimento è assai ridotto poiché l'accensione è troppo anticipata nella corsa di compressione. Poiché quando cambiano velocità di rotazione e carico del motore anche la fasatura dell'autoaccensione cambia, per compensare tale variazione la temperatura della carica deve variare di conseguenza. Questa compensazione però è generalmente un processo lento a causa della elevata inerzia termica e non è ben sfruttabile nei transitori (Nishijima Y., 2002).

– **Rapporto di compressione**

La scelta del rapporto di compressione non è semplice. Un rapporto elevato aiuterebbe di certo ad innescare l'autoaccensione ai carichi più bassi, ma darebbe sicuramente problemi di detonazione agli alti. In condizioni di alto carico dunque il motore deve ricorrere al funzionamento tradizionale. Inoltre un aumento del rapporto di compressione determina un aumento della temperatura dei gas nel cilindro e una maggiore reattività delle specie chimiche: in questo modo la fasatura dell'autoaccensione verrebbe anticipata e il gradiente di pressione aumenterebbe drasticamente.

Il miglior compromesso tra necessità di accensione e andamento del rilascio dell'energia si ha per rapporti di compressione più bassi (Najt P.M., 1983) che sono favorevoli anche per un funzionamento in modalità HCCI più dolce (R.H., 1989). Una soluzione potrebbe essere quella di utilizzare un rapporto di compressione effettivo variabile, che si può attuare attraverso la chiusura ritardata o anticipata della valvola di aspirazione.

– **EGR interno**

Un'altra strategia per facilitare l'autoaccensione ai bassi carichi è quella di utilizzare alti livelli di EGR interno. Nei motori a 4 tempi con sistema di distribuzione a comando variabile, sono possibili 2 tipi di strategie per intrappolare i gas residui:

- Strategia di riaspirazione: i gas di scarico rientrano nel cilindro attraverso uno dei condotti. La figura 2.4 illustra lo schema di funzionamento di questa strategia: nella parte alta si vede che, una volta che la valvola di scarico si apre, i gas caldi escono dal motore e passano

attraverso un sistema di raffreddamento, per poi passare da una valvola che ne regola il flusso verso una camera di miscelazione, in cui essi si miscelano con la carica fresca prima di rientrare nella camera di combustione.

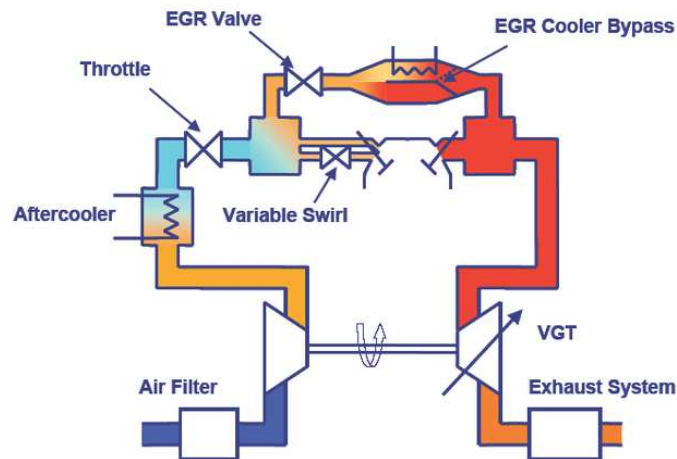


Figura 2. 4: Tecnologia EGR a riaspirazione

Fonte:

<http://www.foursprung.com/2006/08/eco-new-egr-reduces-emissions.html>

- Strategia di ricompressione: le valvole di scarico vengono chiuse in anticipo durante la corsa di scarico per intrappolare i gas combusti nel cilindro. Tale strategia è di più semplice applicazione e può facilmente essere attuata anche con un sistema di distribuzione meccanico, a fasatura e alzata variabili.

In base a prove sperimentali, le due strategie hanno mostrato prestazioni analoghe al fine della diluizione della carica (Allen J., 2002), tuttavia la ricompressione elimina i problemi di gioco tra valvola e pistone, associati alla strategia di riaspirazione in presenza di elevati rapporti di compressione.

– **Iniezione di acqua**

L'uso di un'iniezione d'acqua è stato esaminato come metodo per controllare la fasatura dell'autoaccensione e rallentare il rilascio del calore. Prove sperimentali (Christensen, Homogeneous charge compression ignition with water injection, 1999) hanno confermato tale possibilità, al prezzo però di un aumento delle già elevate emissioni di HC e CO. Le emissioni di NO_x, che sono molto basse nel funzionamento in modalità HCCI, risultano ancora più

ridotte con l'applicazione dell'iniezione d'acqua. Tale strategia ha dimostrato la possibilità di estendere il campo di funzionamento della combustione HCCI diesel verso carichi più elevati (Kaneko N., 2002), con emissioni di NOx estremamente basse e con fumosità praticamente nulla.

– **Sovralimentazione**

La sovralimentazione, cioè l'introduzione forzata della miscela di combustibile nei cilindri rispetto a quella che sarebbe possibile con la normale aspirazione, per garantire al motore maggiore potenza e coppia, è considerata un metodo efficace per estendere il campo di funzionamento del motore in modalità HCCI verso carichi più elevati, consentendo un maggiore rapporto (aria + EGR)/combustibile. Tuttavia essa comporta un'elevata pressione del cilindro che può limitare la sua potenziale applicazione.

Le emissioni HC diminuiscono ad aumentare della pressione di sovralimentazione e del carico del motore, mentre quelle di CO dipendono fortemente dal rapporto aria-combustibile e dal preriscaldamento della carica. Nell'intorno dello stechiometrico e con aria aspirata calda, le emissioni di CO sono trascurabili. In ogni caso gli NOx sono estremamente bassi (Christensen, Demonstrating the multifuel capability of homogeneous charge compression ignition engine with variable campression ratio, 1999).

– **Strategia di iniezione**

Per l'ottenimento di una carica omogenea è necessaria avere un certo tempo per poter miscelare bene l'aria e il combustibile. Il sistema più vantaggioso sembrerebbe quindi l'iniezione indiretta. Tuttavia questo sistema non permette alcuna possibilità di controllo della fasatura della combustione e pone un limite al massimo rapporto di compressione utilizzabile. L'iniezione diretta invece permette di innalzare il rapporto di compressione e così anche di estendere il limite di funzionamento in modalità HCCI a carico più basso. Inoltre questa strategia consente di variare ampiamente la fasatura dell'iniezione e quindi quella della combustione.

Simulazioni CFD hanno dimostrato che la variazione della fasatura di combustione, legata a differente stratificazione della carica e dovuta a diverse fasature di iniezione, può avere un effetto significativo sulle

emissioni (Marriott C.D., 2002). Usando un'iniezione anticipata, per creare una miscela molto omogenea, si hanno emissioni di NOx e particolato estremamente basse, ma HC abbastanza elevati. Al contrario, con un'iniezione ritardata in modo tale da avere una significativa stratificazione della carica, le emissioni di HC vengono ridotte, ma i livelli di NOx e particolato sono inaccettabili. Ottimizzando la saturazione dell'iniezione quindi si possono raggiungere bassi livelli di tutti e tre gli inquinanti sopra citati.

La ricompressione dei gas di scarico consente di ottenere un controllo della combustione HCCI attraverso un processo chiamato pre-attivazione chimica (Willand, 1998), il quale consiste nell'iniettare il combustibile direttamente all'interno dei gas residui intrappolati e ricompressi, prima della fase di aspirazione, in modo da iniziare l'attivazione chimica accelerando il processo di autoaccensione nella successiva fase di compressione.

– **Modifiche al combustibile**

La scelta del combustibile è un aspetto molto importante per lo sviluppo di un motore HCCI.

La volatilità deve essere elevata per poter formare facilmente una carica omogenea.

Dal punto di vista chimico, i combustibili con un'accensione mono stadio sono meno sensibili alle variazioni di carico e di regime di rotazione del motore e questo può facilitare il controllo della combustione HCCI in un ampio campo di condizioni operative.

Al fine di avere un alto rendimento di combustione, la temperatura di autoaccensione è critica per la scelta del rapporto di compressione ottimale.

Il combustibile deve avere delle buone proprietà di accendibilità ai bassi carichi, ma deve anche poter garantire prestazioni agli alti.

Ad esempio, nella combustione HCCI con combustibili per motori ad accensione comandata, il combustibile dovrebbe avere un basso numero di ottano per una rapida autoaccensione, ma anche un alto numero di ottano per fornire elevata potenza ad alto carico nel funzionamento ad accensione comandata senza detonazione. Questa contraddizione nelle caratteristiche richieste al combustibile rende lo sviluppo dei motori HCCI piuttosto difficile.

Ovviamente non c'è un combustibile specifico per il funzionamento in modalità HCCI, ma la scelta dipende dalle strategie di controllo utilizzate e dalle condizioni operative. Si può affermare che i motori HCCI possono funzionare a patto che il combustibile sia “costruito” su misura per quel tipo di motore, o che il motore sia progettato per funzionare con quel certo tipo di combustibile.

Alcuni componenti chimici hanno le proprietà di inibire o promuovere l'autoaccensione, perciò possono essere utilizzati per diminuire o aumentare la reattività del combustibile. Ad esempio utilizzando gas naturale come combustibile, una piccola quantità di NO₂ presente nella carica intrappolata può giocare un ruolo molto importante nel controllo della combustione HCCI. A tal fine si può variare, con opportuni additivi, la quantità di NO₂, anche se deve essere poi valutato l'impatto che questo ha sulla emissioni di NO_x (Ricklin, 2002). Se poi si è in grado di controllare la reattività dei singoli componenti di una miscela di combustibili, si può ottenere il controllo della combustione HCCI in un ampio campo di condizioni operative a seconda della differenza di reattività tra gli stessi componenti (Chen, 2000).

In generale, utilizzando una miscela di due combustibili, uno con un elevato ed uno con un basso numero di ottano, si può ottenere il controllo della combustione in un campo di funzionamento tanto più ampio quanto maggiore è la differenza fra i due componenti; per ottenere migliori risultati, nella miscela è necessario utilizzare il massimo possibili del componente a più alto numero di ottano e il minimo possibile di quello a più basso numero di ottano (Furutani, 1998).

– **Velocità di rotazione del motore**

In teoria, il ritardo di innesco della combustione HCCI dipende in larga parte dalla chimica della miscela ed è relativamente indipendente dalla velocità di rotazione del motore; pertanto si può dire che la fasatura angolare della combustione HCCI risulta ritardata con l'aumentare del regime di rotazione. Quando l'accensione avviene prima del PMS, l'aumento di temperatura dovuto alla compressione compensa il ritardo dovuto all'aumento di velocità. Quando l'accensione avviene dopo il PMS, il ritardo di accensione dovuto

all'aumento della velocità risulta ulteriormente amplificato dall'espansione, che rallenta l'aumento della temperatura. Per raggiungere la fase ottimale di combustione in questo caso, il ritardo di accensione deve essere compensato ad esempio con un aumento della temperatura in aspirazione (Hiraya, 2002). In questo modo però la combustione stabile si sposta verso temperature maggiori, con il rischio che essa possa degenerare in combustione simultanea e di conseguenza si riduce il carico massimo raggiungibile in modalità HCCI.

2.3. SVILUPPI FUTURI

Anche se note case automobilistiche fanno sapere di aver messo a punto motori HCCI, importanti responsabili di laboratori di ricerca evidenziano le difficoltà della loro messa a punto. Si indica nei problemi di funzionamento in transitorio una delle difficoltà maggiori da superare e si fa notare come la differenza di regolazione tra una combustione corretta (con bassa produzione di inquinanti) e una combustione inaccettabile (per irregolarità funzionali o per la quantità di inquinanti) è estremamente piccola: il suo controllo costituisce il maggior problema che devono risolvere i progettisti. E se è vero che una delle tecniche più efficienti per la regolazione è la variazione del rapporto di compressione, non si nasconde la difficoltà tecnica e il costo conseguente alla realizzazione di un rapporto variabile da 13 a 18 nel funzionamento in HCCI, mentre la realizzazione del gruppo propulsore viene resa ancor più complessa dall'esigenza di raggruppare in un unico motore tutta una serie di sistemi di controllo innovativi.

A causa di questi problemi diversi costruttori stanno seguendo anche il criterio del controllo del processo operando soltanto sulla miscelazione della carica fresca con i gas di scarico (alto EGR). Naturalmente con questa soluzione viene resa ancora più complessa la tecnica del controllo del motore, che tuttavia si prevede sia risolvibile grazie alle attuali capacità dei sistemi elettronici.

CAPITOLO 3

MODELLAZIONE DI MOTORI HCCI

Dal momento che lo sviluppo della tecnologia HCCI soffre di seri problemi di controllo e che essi sono interamente regolati dalle cinetiche chimiche, la modellazione di questo tipo di motore è diventata una priorità ed è strettamente legata allo sviluppo di meccanismi cinetici.

Attualmente l'attività modellistica è molto usata nella progettazione dei motori a combustione interna, in quanto permette una notevole riduzione dei costi dovuti alla necessità di sviluppare prototipi.

La capacità di modellare i fenomeni fisici e chimici che condizionano l'auto ignizione della carica, rappresenta un valido supporto per sviluppare una strategia di controllo per i motori HCCI e per la formulazione di adatti combustibili.

Numerosi approcci modellistici sono stati proposti per la simulazione di motori HCCI. Il più semplice considerava il volume del cilindro perfettamente omogeneo. Secondo tale approccio quando le condizioni critiche venivano raggiunte, l'intera miscela aria-combustibile igniva simultaneamente rilasciando calore. Questo modello consentiva l'utilizzo di un meccanismo cinetico dettagliato con un piccolo sforzo in termini di tempo di calcolo, ma ha sempre sovrastimato la velocità di rilascio del calore e il conseguente picco di pressione in quanto la combustione di una carica omogenea risulta essere molto rapida e violenta. Esso è stato abbandonato nel momento in cui dati sperimentali hanno suggerito la presenza di locali disomogeneità della carica all'interno del cilindro, le quali implicano non più una combustione rapida e simultanea di tutta la carica, bensì una sequenza di ignizioni che si susseguono in un breve lasso di tempo nella camera di combustione.

Per tenere conto di queste disomogeneità è necessario utilizzare un approccio multizona, il più semplice tra questi è ovviamente il modello a 2 zone, il quale tiene in considerazione la differenza di temperatura tra la porzione di carica

fresca a contatto con le pareti e quella nella parte più interna della camera di combustione. Fiveland e Assanis proposero un modello a due zone, schematizzato in figura 3.1, migliorando la stima del picco di pressione rispetto ai modelli a singola zona, ma i loro risultati furono limitati dall'utilizzo di uno schema cinetico semplificato (Fiveland & Assanis, 2001).

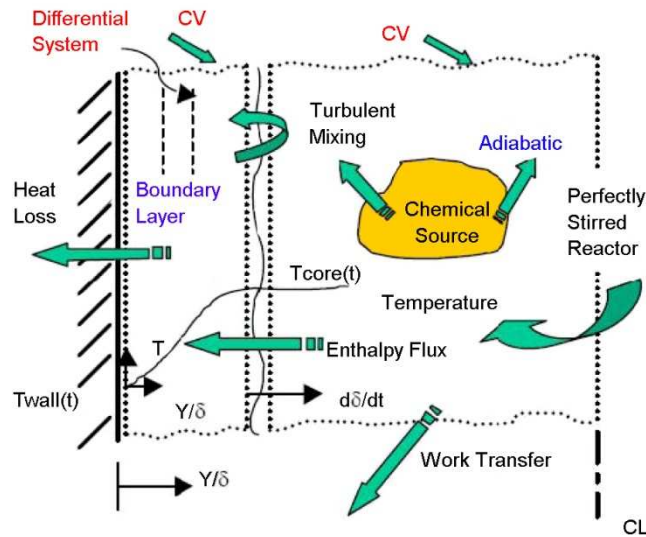


Figura 3. 1: Schematizzazione del modello a due zone Fonte: Fiveland e Assanis, 2001

Komninos, Hountalas e Kouremenos proposero invece un modello multi - zona assumendo una struttura concentrica delle zone, ognuna con la sua storia di temperatura, così come evidenziato in figura 3.2 ; anche in questo caso però venne usato uno schema cinetico semplificato (Komninos, Hountalas, & Kouremenos, 2004).

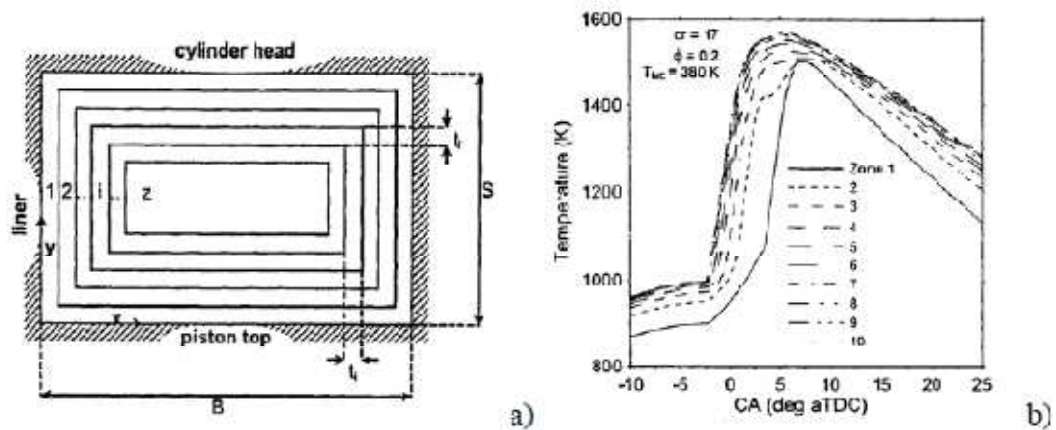


Figura 3. 2: Schematizzazione del modello multizona di Komninos: a) Discrezione spaziale; b) storia della temperatura Fonte: Komninos et al., 2004

Aceves e il suo gruppo di ricerca invece elaborarono un modello multi – zona dettagliato sia dal punto di vista cinetico che fluidodinamico: durante la fase di compressione un calcolo completo a 3 dimensioni di tipo CFD (Computational Fluid Dynamics) valuta la distribuzione della temperatura e della composizione dentro il cilindro; prima dell'autoignizione il calcolo CFD si interrompe e le zone vengono definite sulla base della stratificazione della temperatura e della composizione, a questo punto un modello termo-cinetico viene utilizzato per completare la simulazione del ciclo del motore (Aceves S. , et al., 2005). Questo approccio permette calcoli molto accurati a scapito però degli elevati tempi di calcolo necessari (Mehl, et al., 2007).

L'efficienza dei motori HCCI è stata mostrata da numerosi esperimenti, molti dei quali hanno modellato il motore come un reattore PFR (Amneus, Nilsson, Mauss, Christensen, & Johansson, 1998) (Christensen, Johansson, Amneus, & Mauss, 2000). In queste simulazioni si sono studiate le variabili che incidono sul ritardo di accensione. I risultati indicano che le disomogeneità locali sono responsabili delle differenze rispetto ai dati sperimentali.

Un modo per tener conto di queste disomogeneità, come precedente citato, è l'utilizzo di un modello multizona che tiene conto dell'effetto del boundary layer. Tale modello però non è in grado di tener conto delle fluttuazioni delle variabili all'interno delle zone, ma utilizza nei calcoli cinetici un valore medio per la temperatura e la composizione di ogni singola zona.

Un approccio più sofisticato è quello di utilizzare un modello, basato sulla funzione di densità di probabilità (PDF) delle variabili fisiche importanti nel processo di combustione, in cui quindi il concetto di omogeneità viene sostituito da quello di omogeneità statistica. Purtroppo il costo a livello computazionale per lo studio di numerose reazioni chimiche è molto elevato, per cui sono necessarie delle semplificazioni.

E' possibile assumere che le specie chimiche e la temperatura siano variabili casuali con una PDF che non varia spazialmente nella camera di combustione e modellare la camera stessa tramite una sola zona in cui però temperatura e composizione fluttuano. Modelli di questo tipo sono caratterizzati dalla

simulazione di un partially stirred PFR (PaSPFR), il quale tiene conto delle condizioni turbolente all'interno della camera di combustione che influenzano le fluttuazioni delle variabili. La struttura del boundary layer e degli interstizi sono modellate usando i principi di trasferimento di massa e calore attraverso le pareti del cilindro, i quali vengono tradotti nel contesto dell'approccio casuale (Maigaard, Mauss, & Kraft, 2003) (Kraft, Maigaard, Mauss, Christensen, & Johansson, 2000).

In questo lavoro è stato utilizzato un approccio multi – zona con l'ausilio di uno schema cinetico dettagliato illustrato nel capitolo successivo.

3.1. MODELLO MULTI-ZONA OPEN_SMOKE

L'approccio multizona prevede che quando le valvole sono chiuse il cilindro venga diviso in più zone per tener conto della presenza di una stratificazione della temperatura dovuta essenzialmente alla non completa miscelazione tra la carica fresca e i gas combusti residui presenti nella camera di combustione, e allo scambio di calore che si ha tra la carica a contatto con le pareti, le pareti stesse e la testata del pistone (Mehl, et al., 2007).

Tale modello viene implementato in un codice di calcolo chiamato OPEN_SMOKE, sviluppato presso il Dipartimento di Chimica, Materiali, Ingegneria Chimica Giulio Natta del Politecnico di Milano.

Il modello è stato sviluppato seguendo l'approccio di Aceves e Flowers (Aceves & Flowers, 2001).

Il volume del cilindro è stato diviso in diverse zone in accordo con la distribuzione della temperatura del gas all'interno del cilindro stesso. Ciascuna zona viene trattata come un reattore chiuso ed omogeneo in cui è garantita la conservazione della massa. La pressione è la stessa per ogni zona e il volume totale di tutte le zone è uguale al volume del cilindro, variabile secondo la seguente legge:

$$\frac{d(V/V_C)}{dt} = \Omega \left(\frac{C-1}{2} \right) \sin \theta \left[1 + \frac{\cos \theta}{\sqrt{R^2 - \sin^2 \theta}} \right]$$

dove:

V_C = volume minimo del cilindro quando il pistone è al PMS;

C = Rapporto di compressione definito come $C = (V_{max} + V_C)/V_C$, con V_{max} pari alla cilindrata del motore;

Ω = velocità di rotazione dell'albero motore pari $(d\theta/dt)$;

θ = angolo di manovella;

R = rapporto tra la lunghezza della biella (L_c) e la lunghezza della manovella (L_a).

Le zone non scambiano tra loro né materia né energia, la sola interazione tra loro è dovuta alla conservazione del volume totale: se una zona per effetto delle reazioni di ossidazione espande il suo volume, le zone confinanti dovranno contrarsi per mantenere costante il volume totale.

Riassumendo, le assunzioni su cui si basa il modello proposto sono le seguenti:

- Tutte le zone presentano la stessa pressione.
- Assenza di scambi di massa ed energia tra le zone. La sola interazione tra loro riguarda il lavoro di compressione.
- Il volume totale delle zone deve essere uguale al volume del cilindro in relazione alla posizione del pistone.

3.1.1. EQUAZIONI GOVERNANTI

Le equazioni che governano il modello multi-zona sono le seguenti:

NC Equazioni di conservazione delle specie

1 Equazione di conservazione dell'energia

1 Equazione per il calcolo del volume della singole zone

1 Equazione per il calcolo della pressione

Per un totale di $N(NC+3)$ equazione, con N = numero di zone e NC = numero delle specie.

EQUAZIONI DI CONSERVAZIONE DELLE SPECIE

$$\rho_i \frac{dY_{k,i}}{dt} = \dot{\omega}_{k,i} W_k \quad \text{con } i = 1, \dots, N_{\text{zone}} \text{ e } k = 1, \dots, N_{\text{specie}}$$

dove:

ρ = densità della i -esima zona

$Y_{k,i}$ = frazione massiva della k -esima specie nella i -esima zona

$\dot{\omega}_{k,i}$ = velocità di produzione della k -esima specie nella i -esima zona

W_k = peso molecolare della k -esima specie

EQUAZIONE DI CONSERVAZIONE DELL'ENERGIA

$$\rho_i C_{V,i} \frac{dT_i}{dt} = - \sum_{k=1}^{N_{\text{zone}}} \dot{\omega}_{k,i} W_k u_{k,i} - \frac{P_i}{V_i} \frac{dV_i}{dt} - \frac{h_i^w (T - T_w) \lambda_i^w}{V_i}$$

dove:

$C_{V,i}$ = calore specifico a volume costante della miscela di gas nella i -esima zona

$u_{k,i}$ = energia interna della k -esima specie

P_i, T_i e V_i = pressione, temperatura e volume della i -esima zona

h_i^w = coefficiente di scambio termico convettivo dei gas nella i -esima zona

T_w = temperatura della parete del cilindro

λ_i^w = area di scambio della i -esima zona

Il modello multi-zona assume che solo una zona, quella che si trova a contatto diretto con le pareti del cilindro, è in grado di scambiare calore con l'esterno. Tale zona viene definita boundary layer e corrisponde a circa il 10-15% della massa totale nella camera di combustione. L'area di scambio è pari all'area laterale del cilindro.

Il coefficiente di scambio termico convettivo dei gas presenti in camera di combustione sono stati calcolati grazie al modello di Woschni, il quale ricava una relazione per questa grandezza a partire da considerazioni di tipo fisico:

$$Nu_h = \frac{hD}{\lambda} = aRe^b = a \left(\frac{D\bar{w}\rho}{\mu} \right)^b$$

dove:

Nu_h = Numero di Nusselt termico

h = coefficiente di scambio termico convettivo dei gas

D = diametro interno del cilindro

λ = conduttività termica

Re = Numero di Reynolds

\bar{w} = velocità media dei gas nel cilindro

ρ = densità dei gas

μ = viscosità dinamica dei gas

$a = 0.35-0.8$

$b = 0.7$

Per ottenere la velocità media dei gas nel cilindro, Woschni ha proposto una correlazione che lega tale velocità a quella media del cilindro (\bar{S}_p) e all'incremento di pressione dovuto alla combustione ($P - P_{motore}$):

$$\bar{w} = \left[\left(C_{11} + C_{12} \frac{v_{swirl}}{\bar{S}_p} \right) \right] \bar{S}_p + C_2 \frac{V_d T_i}{P_i V_i} (P - P_{motore})$$

dove:

C_{11} , C_{12} e C_2 = parametri del modello

v_{swirl} = velocità dei vortici

V_d = cilindrata del motore

P_i , T_i , V_i = pressione, temperatura e volume iniziali nel cilindro

P_{motore} = pressione associata alla compressione isentropica ricavata dalla seguente

relazione:

$$\frac{P_{motore}}{P} = \left(\frac{V}{V_{ref}} \right)^\gamma$$

con $\gamma = C_p/C_v$

EQUAZIONE PER IL CALCOLO DEL VOLUME DELLE SINGOLE ZONE

Nel modello multi-zona il volume del cilindro è determinato dalla relazione vista in precedenza. Il volume delle singole zone invece non è noto ed è necessario determinarlo.

Dal momento che la composizione e la temperatura dei gas in ogni zona sono determinate dalle equazioni di conservazione delle specie e dell'energia, il volume e la pressione sono accoppiate dall'equazione dei gas ideali.

Per risolvere il sistema di equazioni in maniera più efficiente si introduce una variabile ausiliaria così definita:

$$G_i = \sum_{j=1}^i P_j V_j \quad \rightarrow \quad V_i = \frac{G_i - G_{i-1}}{P_i}$$

Dato che la pressione è la stessa in ogni zona, la variabile G può essere considerata come una pressione pesata accumulata nel volume della singola zona. L'uso della pressione come fattore scalante aiuta a minimizzare la variazione di G durante il ciclo del motore. In aggiunta, rimpiazzando il volume della zona, V , con la variabile G , lo Jacobiano risulta essere tridiagonale a blocchi e non pieno, quindi il sistema può essere integrato in maniera più efficiente.

L'equazione che governa la nuova variabile viene ricavata dall'equazione di stato dei gas perfetti:

$$G_i = P_i V_i = M_i R T_i \left(\sum_{k=1}^{N_{specie}} \frac{Y_{k,i}}{W_k} \right)$$

e, in accordo con la definizione di G

$$G_i = G_{i-1} + P_i V_i = G_{i-1} + M_i R T_i \left(\sum_{k=1}^{N_{specie}} \frac{Y_{k,i}}{W_k} \right)$$

dove:

R = costante universale dei gas

M_i = massa di gas nella i-esima zona.

EQUAZIONE PER IL CALCOLO DELLA PRESSIONE

L'assunzione di pressione uniforme tra tutte le zone mette un vincolo e fornisce un accoppiamento tra le zone:

$$P_i = P_{i+1} \quad \text{per } i = 1, \dots, N_{zone} - 1$$

Per chiudere l'equazione sulla pressione il vincolo sul volume

$$V_{cilindro} = \sum_{i=1}^{N_{zone}} V_i$$

viene utilizzato per determinare la pressione nell'ultima zona.

Sostituendo le ultime due equazioni nella definizione della variabile ausiliaria G, l'equazione che governa la pressione nell'ultima zona è la seguente:

$$P_{N_{zone}} = \frac{G_{N_{zone}}}{V_{cilindro}}$$

Riassumendo quindi il calcolatore si trova a dover risolvere il seguente sistema di equazioni per ottenere le proprietà delle varie zone (CHEMKIN-PRO - Theory Manual, 2008):

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_i \frac{dY_{k,i}}{dt} = \dot{\omega}_{k,i} W_k \quad \text{con } i = 1, \dots, N_{zone} \text{ e } k = 1, \dots, N_{specie} \\ \rho_i C_{V,i} \frac{dT_i}{dt} = - \sum_{k=1}^{N_{zone}} \dot{\omega}_{k,i} W_k u_{k,i} - \frac{P_i dV_i}{V_i dt} - \frac{h_i^w (T - T_w) \lambda_i^w}{V_i} \\ G_i = P_i V_i = M_i R T_i \left(\sum_{k=1}^{N_{specie}} \frac{Y_{k,i}}{W_k} \right) \\ P_i = P_{i+1} \quad \text{per } i = 1, \dots, N_{zone} - 1 \\ P_{N_{zone}} = \frac{G_{N_{zone}}}{V_{cilindro}} \end{array} \right.$$

Essendo equazioni di tipo stiff per essere risolte richiedono un algoritmo di integrazione implicita efficiente, per questa ragione il sistema ODE è risolto utilizzando le classi numeriche C++ sviluppate nel Dipartimento di Chimica, Materiali, Ingegneria Chimica Giulio Natta del Politecnico di Milano dal Prof. Buzzi-Ferraris (Buzzi-Ferraris & Manca, A New C++ Class for the Solution of Stiff and Non Stiff Ordinary Differential Equation Systems, 1998) (Buzzi-Ferraris, Numerical Libraries in C++). Il pacchetto BzzODE permette di risolvere sia sistemi stiff che non stiff e è fondamentale quando si tiene conto in maniera dettagliata della chimica dei radicali.

L'ottimizzazione è stata portata avanti secondo due modalità:

- riorganizzazione delle variabili integrande
- ottimizzazione del calcolo dello Jacobiano delle funzioni

L'implementazione del modello Multizona ha richiesto l'introduzione di nuove variabili: infatti, ogni zona ha una sua temperatura e una sua composizione e i tempi di calcolo crescono con il quadrato del numero di equazioni, quindi operare con un numero elevato di zone può risultare estremamente gravoso. Introducendo però l'ipotesi di impermeabilità e adiabaticità tra le zone è possibile, con un'attenta scrittura della conservazione dei volumi che eviti accoppiamenti delle variabili tra le zone, ottenere una formulazione più compatta detta Jacobiano che rende più efficiente il calcolo. In particolare, organizzando il vettore delle integrande come: $y = [X_1, X_2, \dots, X_n, X_1, X_2, \dots, X_n, X_1, X_2, \dots, X_n, v_k, v_{key}, P, T_1, T_2, \dots, T_N]$, si ritrova una struttura dello Jacobiano a blocchi (che corrispondono alle varie zone) e bande finali (che corrispondono alle variabili comuni a tutto il cilindro) (Mehl, PhD Thesis, 2007).

CAPITOLO 4

IL MECCANISMO CINETICO

4.1. LA CHIMICA DEL PROCESSO IN DETTAGLIO

Come descritto nei capitoli precedenti la cinetica chimica svolge una parte dominante nel controllo della combustione HCCI, per questo motivo è necessario accoppiare ai modelli descritti uno schema cinetico dettagliato che descriva la chimica del processo.

La modellazione cinetica dell'ossidazione e dell'auto-ignizione di combustibili di tipo idrocarburico richiede un'attenta analisi dei meccanismi di alta e bassa temperatura.

In questo lavoro è stato utilizzato un meccanismo cinetico dettagliato, consistente in più di 300 specie e 6000 reazioni, sviluppato presso il Dipartimento di Ingegneria Chimica G.Natta del Politecnico di Milano (Ranzi, Faravelli, Gaffuri, Sogaro, D'Anna, & Ciajolo, 1997) (Ranzi, Gaffuri, Faravelli, & Dagaut, 1995).

In questo capitolo viene quindi riportata una breve descrizione di questo approccio.

Lo schema cinetico è basato su un approccio gerarchico: il cuore consiste in un dettagliato sub-meccanismo per le specie C_1 - C_4 , mentre una caratteristica struttura modulare permette l'introduzione di differenti sub-meccanismi per descrivere l'ossidazione di idrocarburi a più atomi di carbonio e la formazione di specie inquinanti.

L'intero meccanismo è basato su alcuni parametri cinetici che definiscono le principali classi di reazioni a seconda dei differenti range di temperatura ed è stato ampiamente testato su un largo set di dati sperimentali riferiti a reattori ideali come rapid compression machine, shock tubes e flow reactors (Mehl, PhD Thesis, 2007).

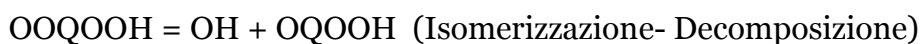
4.2. CINETICHE DI AUTO-IGNIZIONE

Il fenomeno di auto-ignizione nei motori a combustione interna è il risultato di una complessa sequenza di reazioni che avvengono nella miscela dei gas incombusti. L'auto-ignizione è caratterizzata dalla transizione improvvisa dal meccanismo a bassa temperatura e quello ad alta temperatura che causa un rapido rilascio di calore. Questo particolare comportamento, tipico di molti idrocarburi a numero di carbonio elevato, non è limitato ai soli motori. Per poter investigare i meccanismi elementari coinvolti in tale fenomeno, infatti, vengono utilizzati reattori ideali come la Rapid Compression Machine, Jet Stirred Reactor o PFR, premettendo di rimuovere le difficoltà fluido dinamiche presente nei motori.

La struttura delle molecole influenza pesantemente la transizione tra i meccanismi di alta e bassa temperatura, come discusso nel prossimo paragrafo in cui viene presentato il meccanismo di combustione degli alcani, in quanto nel presente lavoro l'idrocarburo utilizzato per alimentare il motore è n-eptano puro.

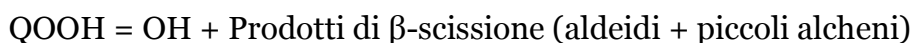
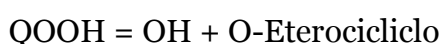
4.3. COMBUSTIONE DI ALCANI

Alle alte temperature (sopra i 1000 K), la decomposizione dei radicali alchilici (R) e la successiva decomposizione degli alcani sono le reazioni principali. Sotto gli 850-900 K è favorita invece l'addizione diretta del radicale alchilico su ossigeno e il risultante radicale ROO subisce il branching attraverso le seguenti reazioni:



Queste reazioni generano i chetoidroperossidi (OQOOH) e iradicali ossidrilici (OH). Dato che i chetoidroperossidi sono intermedi molto instabili, tendono a decomporsi rapidamente formando due radicali attraverso una reazione di decomposizione unimolecolare. La fase di transizione tra i meccanismi di alta e bassa temperatura è determinata dall'equilibrio della reazione $R+O_2=ROO$, la quale è fortemente influenzata sia dalla temperatura che dalla pressione.

Alle temperature intermedie (tra i 700 e i 900K), il radicale alchilidroperossidico può decomporsi seguendo tre differenti percorsi:



Sopra i 900 K, i radicali alchilici sono favoriti e ciò porta a due importanti percorsi reattivi. In entrambe questi percorsi l'estrazione diretta di un atomo di idrogeno avviene via $R+O_2 = HO_2 + \text{Alchene coniugato}$, la quale genera appunto HO_2 come specie primaria in grado di propagare, oppure si ha la reazione di beta-scissione del radicale alchilico R con la formazione di alcheni e piccoli radicali alchilici. Il risultato di questo complesso meccanismo porta alla generazione della fiamma fredda e alla successiva ossidazione dei piccoli radicali.

Questo meccanismo viene applicato a normal-alcanti, iso-alcanti e ciclo-alcanti, anche se gli iso-alcanti mostrano alcune differenze nel comportamento durante la fase di auto ignizione. L'esempio più lampante si ha confrontando il comportamento del normal-eptano con quello dell'iso-ottano. La differente reattività è dovuta alla differente struttura molecolare, infatti i radicali perossidici degli alcanti lineari hanno la possibilità di estrazioni di un elevato numero di atomi H secondari, mentre negli alcanti ramificati la sostituzione alchilica dei radicali perossidici riduce il numero di atomi di H secondari disponibili all'isomerizzazione. Confrontando i radicali perossidici del n-eptano e dell'iso-ottano è evidente che l'isomerizzazione del n-eptano è più veloce: il fattore pre-esponenziale è due volte più grande, in quanto si possono estrarre 4 atomi di H secondari in vece di 2, e l'energia di attivazione è di circa 6000

kcal/kmol. La seconda differenza consiste nell' impossibilità di alcuni radicali perossi-alcil-idroperossidici di decomporsi verso i chetoidroperossidi. Questo è il caso dei radicali perossi-alcil-idroperossidici con un atomo di carbonio terziario legato al gruppo idroperossido. Questi radicali possono lentamente decomporsi a radicali alcil-idroperossidici o possono subire reazioni di omolisi relativamente lente.

Queste differenze sono riassunte nelle figure 4.1 e 4.2, dove sono schematizzate le reazioni di bassa temperatura dell' n-eptano e dell'iso-ottano (Mehl, PhD Thesis , 2007).

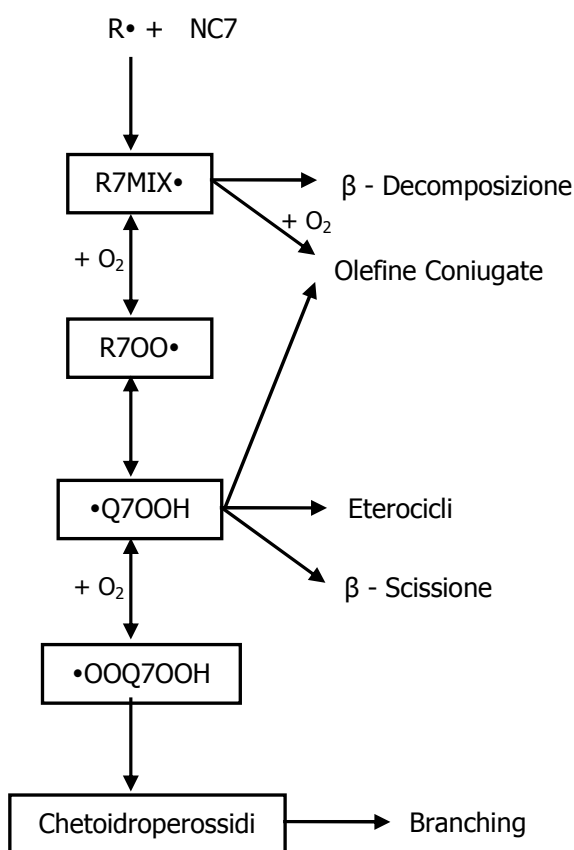


Figura 4. 1: Meccanismo di ossidazione di bassa temperatura per il n-eptano
Fonte: (Mehl, PhD Thesis , 2007)

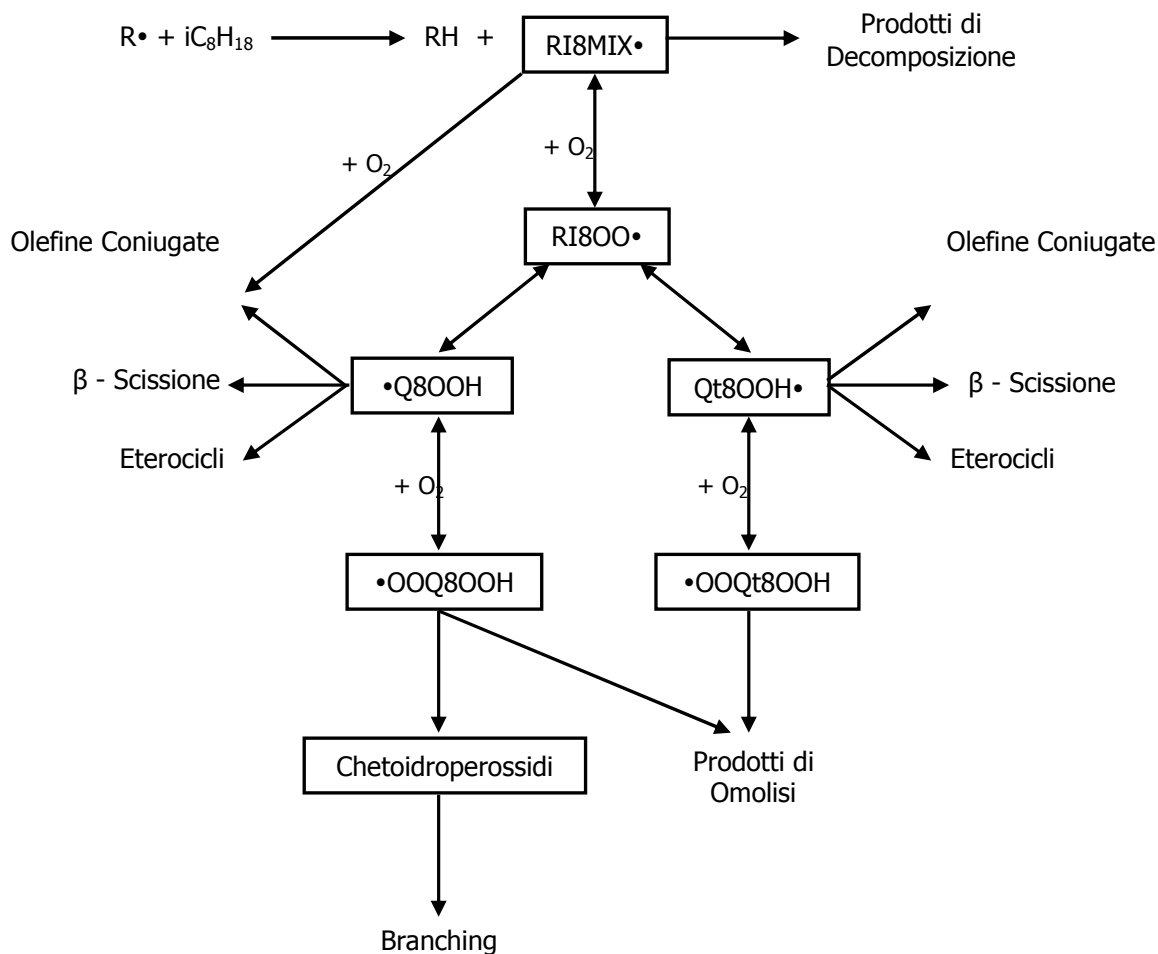


Figura 4. 2: Meccanismo di ossidazione di bassa temperatura per l'isottano
 Fonte: (Mehl, PhD Thesis , 2007)

4.4. SVILUPPO INQUINANTI

Per controllare lo sviluppo di specie inquinanti di natura non idrocarburica prodotte durante la combustione, all'interno del meccanismo cinetico utilizzato è possibile trovare un modulo che descrive i meccanismi di formazione degli ossidi di azoto, principali specie appartenenti a tale categoria per quantità di emissione, e le loro specifiche interazioni con l'ossidazione di idrocarburi. NO svolge un effetto favorevole sulle reazioni di bassa temperatura dovuto alla sua interazione con i radicali ROO:

$ROO + NO = RO + NO_2$, dove R può essere sia un atomo di H che un gruppo alchilico.

Se R è un atomo di idrogeno il consumo dei radicali HO_2 da origine agli aggressivi radicali OH, aumentando la reattività del sistema, mentre se R è un gruppo alchilico i radicali RO decompongono verso radicali alchili e aldeidi, molto meno reattivi (Mehl, et al., 2007). E' possibile trovare una descrizione completa delle reazioni coinvolte in questo processo in (Frassoldati, Faravelli, & Ranzi, 2003).

CAPITOLO 5

RISULTATI

L'obiettivo di questo lavoro è quello di caratterizzare la combustione di n-eptano in un motore a combustione omogenea attraverso una modellazione multi-zona, con lo scopo di sviluppare un modello in grado di cogliere quelle caratteristiche che rendono difficile il controllo di questo tipo di combustione.

5.1. DESCRIZIONE DEL SISTEMA SPERIMENTALE

I dati sperimentali a cui si riferisce questo lavoro sono derivati dalle prove effettuate su un motore da ricerca Ricardo E6 a singolo cilindro, le cui caratteristiche sono riportate in tabella 5.1:

APERTURA VALVOLA DI AMMISSIONE	8° Prima del Punto Morto Superiore (PMS)
CHIUSURA VALVOLA DI AMMISSIONE	36° Dopo il Punto Morto Inferiore (PMI)
APERTURA VALVOLA DI SCARICO	43° Prima del Punto Morto Inferiore (PMI)
CHIUSURA VALVOLA DI SCARICO	6° Dopo il Punto Morto Superiore (PMS)
CORSA	76 mm
ALESAGGIO	111 mm
CILINDRATA	0.5 latria
LUNGHEZZA DELLA BIELLA	245 mm
RAPPORTO DI COMPRESSIONE	4.5:1 – 20:1

Tabella 5. 1: Caratteristiche del motore da ricerca Ricardo E6

I ricercatori hanno scelto di utilizzare n-eptano come combustibile per simulare la combustione HCCI di un gasolio, perché tale idrocarburo presenta un numero di cetano simile a quello dei caratteristici combustibili utilizzati nei motori Diesel e, come questi, presenta un processo di ignizione a due stadi.

Le condizioni operative sono state determinate tramite l'esecuzione di alcuni test preliminari e sono riportate in tabella 5.2:

VELOCITA' DEL MOTORE	1500 rpm
----------------------	----------

TEMPERATURA DI AMMISSIONE DELLA CARICA	30°C, 70°C, 150°C
RAPPORTO DI COMPRESSIONE	12:1, 15:1, 18:1

Tabella 5. 2: Condizioni operative del motore da ricerca Ricardo E6

Il lavoro di ricerca presenta come scopo quello di ottenere una mappa delle condizioni di operabilità del motore HCCI e di investigare sull'influenza di alcune variabili sull'estensione di tale mappa. In particolare le variabili studiate sono la temperatura di ammissione della carica e il rapporto di compressione.

5.2. DESCRIZIONE DEL SISTEMA MODELLISTICO

Nella modellazione dei motori a combustione interna, come descritto nel capitolo 3, è necessario trovare un compromesso tra la precisione della simulazione e il tempo di calcolo. In questo caso si è deciso di operare con 4 zone, organizzate come descritto in tabella 5.3:

ZONA	FRAZIONE MASSIVA	TEMPERATURA	SCAMBIO DI CALORE
1	0.1	T_ ammissione carica	SI
2	0.2	+20°C T_ ammissione carica	NO
3	0.5	T_ ammissione carica	NO
4	0.2	-20°C T_ ammissione carica	NO

Tabella 5. 3: Descrizione delle zone del modello multi - zona

Le diverse temperature di ammissione della porzione di carica assegnata a ciascuna zona permettono di simulare le disomogeneità tipiche della combustione HCCI.

Partendo dai dati sperimentali, per costruire la mappa di operabilità sono state eseguite diverse prove, variando λ da 1 a 18 e la percentuale massiva di EGR dallo 0% all'80%.

In questo lavoro non è stato studiato l'effetto della variazione del rapporto di compressione, il quale è stato mantenuto costante a 18:1 per ciascuna prova.

Per quanto riguarda invece la temperatura di ammissione della carica, le prove sono state effettuate a 30°C e 105°C. In merito a questa variabile è necessario

fare una precisazione: sperimentalmente la temperatura di ammissione della carica è la temperatura del combustibile prima che esso venga caricato nel motore, essa poi tende ad aumentare prima che il combustibile arrivi nella camera di combustione a causa del contatto con i condotti caldi del motore. A livello modellistico però, poiché il modello si propone di simulare solo ciò che avviene all'interno della camera di combustione, la temperatura che interessa è quella a cui si trova il carburante nel momento in cui entra nel cilindro. Non avendo a disposizione questo dato sperimentale, tale variabile è stata ipotizzata per ciascuna prova alla luce di alcune simulazioni che hanno messo evidenza il fatto che essa risente sempre meno dell'influenza della quantità di EGR man mano che λ aumenta. L'andamento della temperatura del combustibile prima che esso entri nel cilindro, scaturito dalle ipotesi fatte, al variare di λ e della quantità di EGR è rappresentato nel grafico 5.1, in cui sono illustrati entrambe i casi presi in considerazione (temperatura di alimentazione sperimentale pari a 30°C e 105°C). Il dato sperimentale che ha permesso di comprendere le modalità di variazione della temperatura di alimentazione nelle diverse condizioni, è quello riguardante la massima temperatura registrata nella camera di combustione. Come si può osservare dal grafico 5.2, le temperature massime registrate dal modello sulla base dell'ipotesi fatta tendono a essere sovrastimate per bassi valori di EGR e, viceversa sottostimate per valori elevati. L'ipotesi fatta è quindi un compromesso tra le diverse condizioni studiate, che permette di ottenere risultati che non si discostano troppo dai dati sperimentali. Per quanto riguarda le prove a 105°C si è mantenuta valida la stessa ipotesi, aumentando le temperature ipotizzate a 30°C dello stesso ΔT sperimentale, ossia 75°C.

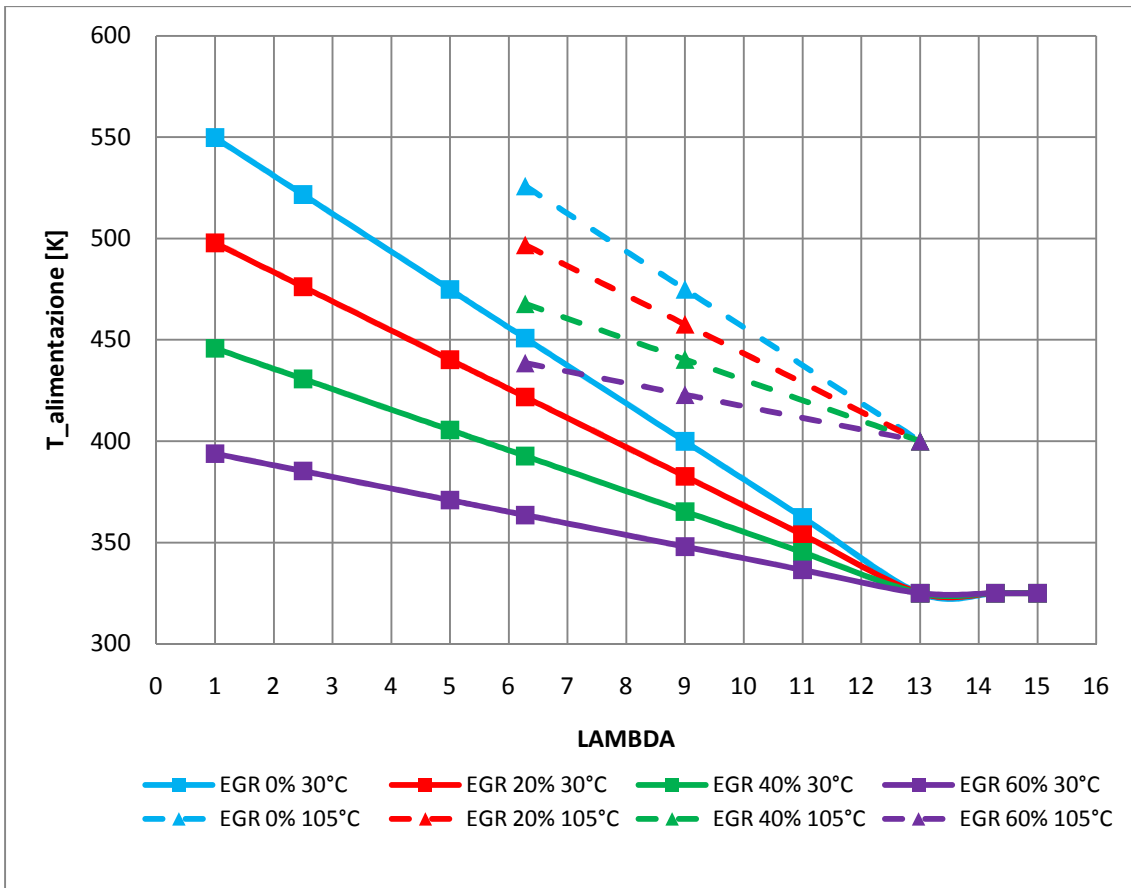


Grafico 5. 1: Confronto Temperatura Alimentazione Carica a 30°C e 105°C

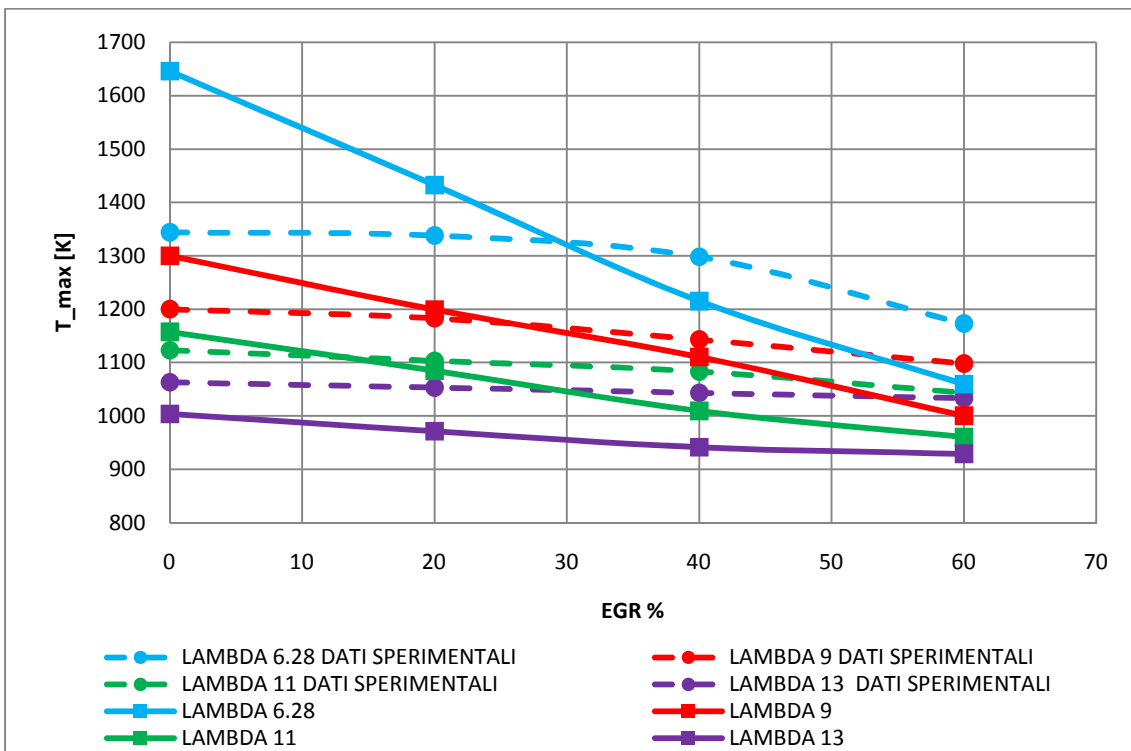


Grafico 5. 2: Confronto Temperatura Massima - Dati Sperimentali/Prove a 30°C

Un'altra variabile necessaria per l'implementazione del modello, ma non nota nel suo valore sperimentale, è la temperatura della parete con cui la zona più esterna scambia calore e che, ovviamente, influenza l'andamento della temperatura durante la combustione. Dopo aver effettuato diverse simulazioni, si è scelto di fissare questa temperatura a 400K, in quanto lo si è ritenuto un valore ragionevole alla luce delle condizioni operative.

Il fatto che il modello sia in grado di simulare solo ciò avviene nella camera di combustione porta a dover formulare delle ipotesi anche in merito all'area di scambio termico. Essa, infatti, modellisticamente è l'area laterale del cilindro, ma in realtà nello scambio termico sono coinvolte anche valvole e condotti, per cui l'area di scambio è maggiore rispetto a quanto considerato. Nella realtà motoristica sullo scambio di calore incidono anche gli sporcamenti della parete dovuti alla carica idrocarburica, i quali vengono trascurati per semplicità nel modello.

Un'ulteriore ipotesi fatta per avvicinarsi il più possibile alle reali condizioni sperimentali riguarda la quantità di gas esausti che rimangono nel volume morto del motore, ossia in quella sezione della camera situata nella parte alta che il pistone non riesce a raggiungere poiché presenta una sezione conica. Il modello non tiene conto di questo volume morto, per cui all'apertura della valvola di scarico tutti i gas prodotti durante la fase di combustione vengono scaricati. La presenza di questi gas caldi incide sulla temperatura e sulla composizione della carica fresca al ciclo successivo ed è solitamente pari al 10% dei gas totali prodotti. L'unico modo per tener conto della presenza di questi gas nel modello è stato aumentare del 10% la quantità di EGR entrante, con lo svantaggio però di perdere l'informazione in merito alla loro temperatura, poiché l'EGR è raffreddata prima di essere reimpressa nella camera.

5.3. MAPPE DI OPERABILITA'

Per mappa di operabilità si intende l'insieme delle condizioni operative (λ e % di EGR) per le quali il motore HCCI funziona correttamente.

Le situazioni in cui il motore presenta un funzionamento non corretto sono essenzialmente 3:

a. KNOCK

Si incorre nel fenomeno del knock quando si opera con una miscela stechiometrica o per piccoli eccessi di aria (bassi valori di λ) e basso EGR. In queste condizioni si sviluppano combustioni molto violente e molto veloci a causa dell'insufficiente diluizione di EGR e aria: lavorando con poco EGR si ha più carica fresca nel cilindro, quindi più massa coinvolta nella combustione che, liberando energia, causa il raggiungimento di picchi altissimi di temperatura e pressione. A causa delle temperature elevate si registrano anche notevoli emissioni di NOx. Con combustioni rapide e violente il pistone può provocare il battito in testa, fenomeno che può arrecare seri danni agli organi meccanici del motore.

b. MISFIRE

Il misfire si registra operando con un'alta percentuale di gas combusti e una miscela piuttosto ricca (bassi valori di λ): l'ignizione risulta tardiva e incompleta a causa dell'eccessiva diluizione, ma una volta innescata la combustione, essa avviene in modo completo. Man mano che la quantità di EGR aumenta, si ha un aumento della frequenza di cicli in misfire, fino a che non si raggiunge una frequenza tale da ridurre a zero il lavoro prodotto dal cilindro.

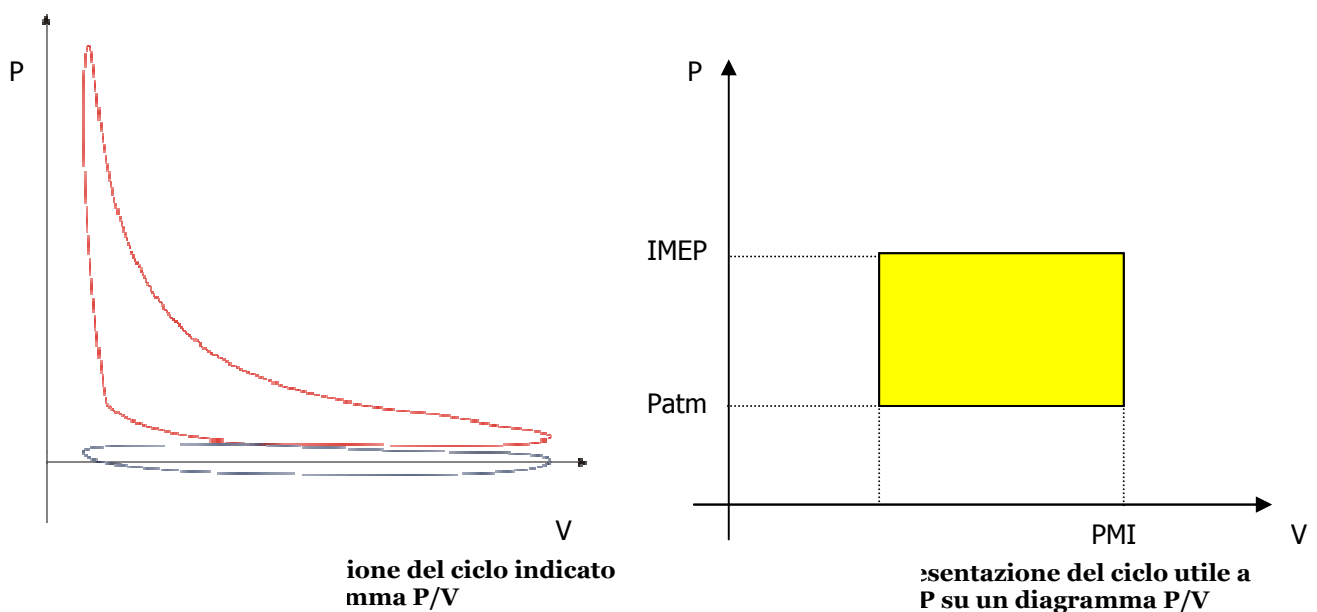
c. PARTIAL BURN

Il partial burn si ha in condizioni estreme con EGR ad aria in eccesso (λ elevati). L'abbondante diluizione del sistema causa il raggiungimento di temperature di combustione molto basse, con riduzione delle efficienze in

gioco. Il motore smette di funzionare quando il lavoro prodotto dal pistone diventa nullo.

Queste 3 condizioni impongono i limiti nella mappa di operabilità del motore HCCI.

Dalla descrizione dei fenomeni che limitano il funzionamento del motore, è stato possibile definire le variabili da utilizzare per verificare sperimentalmente se il motore funziona o no. Per determinare le condizioni di knock i ricercatori hanno misurato la frequenza di vibrazione del motore e hanno stabilito il limite a 8 kHz. Per quanto riguarda invece partial burn e misfire, la variabile misurata è la pressione effettiva media indicata (IMEP) di ogni ciclo. In un motore da banco è possibile rilevare un diagramma che fornisca le pressioni all'interno del cilindro in funzione del volume disponibile, esso è chiamato tradizionalmente ciclo indicato. Il ciclo indicato, rappresentato in figura 5.1, è così detto poiché viene rilevato durante il funzionamento del motore mediante uno strumento chiamato indicatore, che misura istante per istante la pressione all'interno del cilindro. Se si sostituisce al ciclo indicato un ciclo (inesistente), rappresentato in figura 5.2, formato da due isometriche e due isobare che si svolge tra gli stessi volumi iniziale e finale del ciclo indicato e tra la pressione atmosferica e una pressione tale che l'area racchiusa da questo ciclo sia uguale all'area racchiusa dal ciclo indicato (cioè sia equivalente al lavoro indicato) si ottiene il valore della IMEP (Ferrari, Motori a combustione interna, 2008).



Essa quindi può essere determinata dal rapporto tra il lavoro effettuato dal pistone del motore e il volume totale della camera di combustione.

$$IMEP = \frac{L_i}{V_{cilindro}} = \frac{\int P dV}{Cilindrata + Volume Morto}$$

Quando la IMEP si annulla, il motore non produce più lavoro e quindi cessa di funzionare, per cui $IMEP = 0$ è il limite operativo riguardante il partial burn.

Per determinare il misfire, i ricercatori calcolano invece il coefficiente di variazione della IMEP (COV_{IMEP}), ossia la deviazione standard della IMEP misurata su 400 cicli.

Dal punto di vista modellistico, non avendo a disposizione delle misure dirette, i limiti di operabilità devono essere dedotti sulla base di informazioni sperimentali e di letteratura.

Per quanto riguarda il partial burn è stato possibile utilizzare lo stesso limite sperimentale poiché la IMEP è facilmente calcolabile. Tale limite è stato preso come riferimento anche per la determinazione del misfire in quanto, per motivi legati ai tempi di calcolo, non è possibile eseguire simulazioni di 400 cicli del motore.

Per l'individuazione del knock si è scelto invece di valutare la velocità di incremento della pressione all'interno del cilindro (dP/dt), in quanto nel momento in cui il motore va in knock, la pressione tende a salire velocemente a valori molto elevati (Yoshizawa, Teraji, Miyakubo, & Urushihara). Alla luce dei dati sperimentali il limite è stato fissato per valori di dP/dt massimi in un ciclo pari a 2430.48 MPa/s per le prove a 30°C e 2498.8 MPa/s per le prove a 105°C.

Le mappe di operabilità ottenute per le due diverse temperature di ammissione della carica sono visibili nei grafici 5.3 e 5.4, mentre sul grafico 5.5 è possibile

osservare un confronto diretto tra le due mappe:

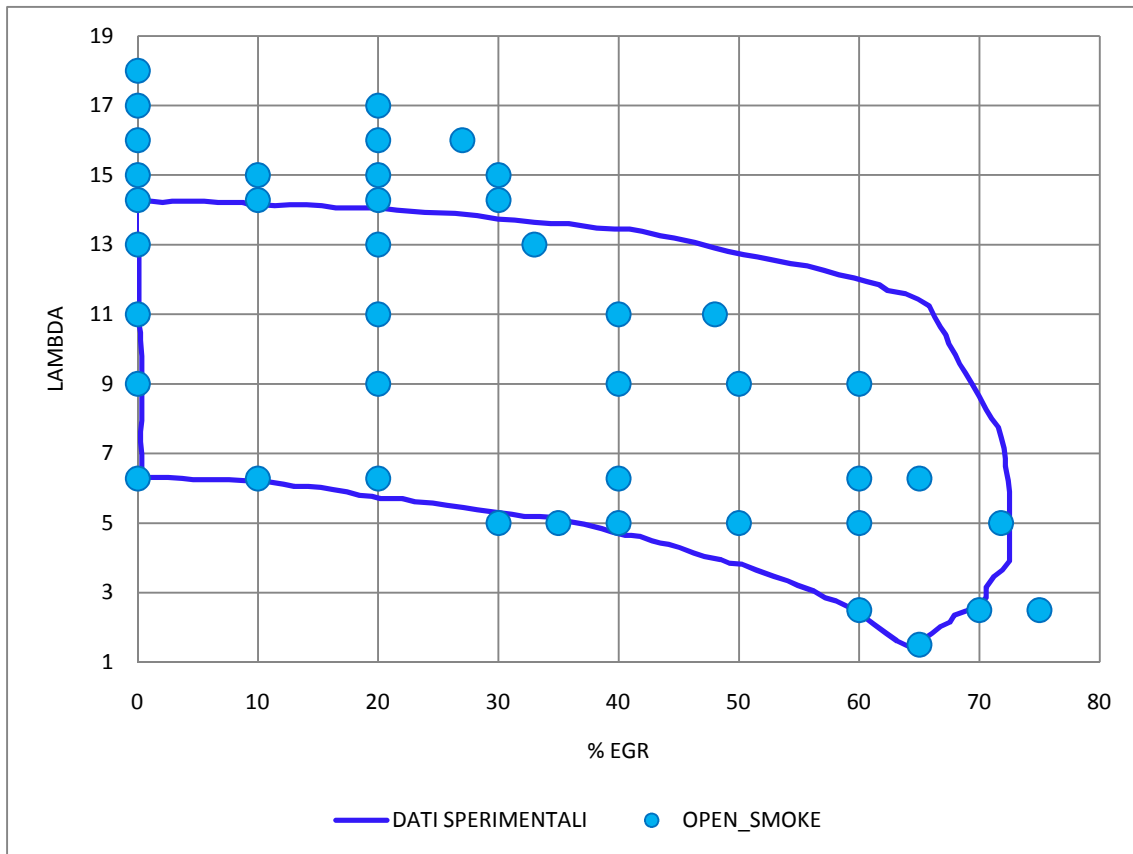


Grafico 5. 3: Mappa di Operabilità con temperatura della carica pari a 30°C

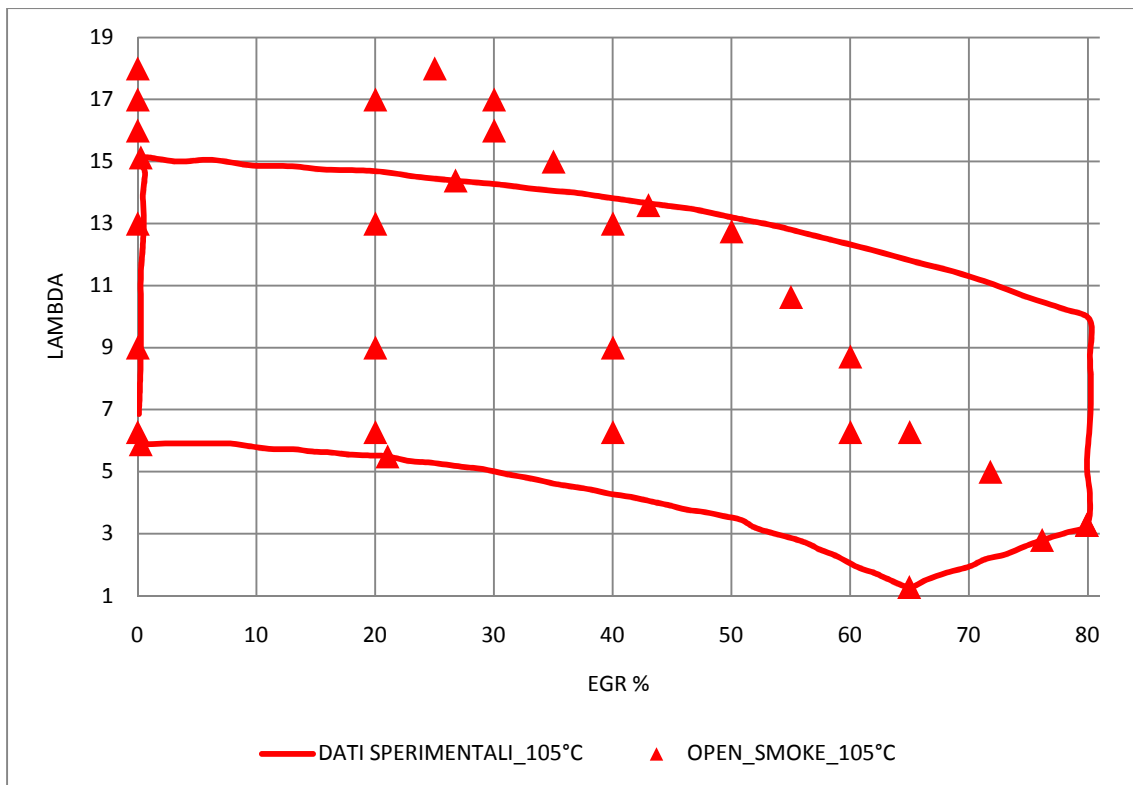


Grafico 5. 4: Mappa di Operabilità con temperatura della carica pari a 105°C

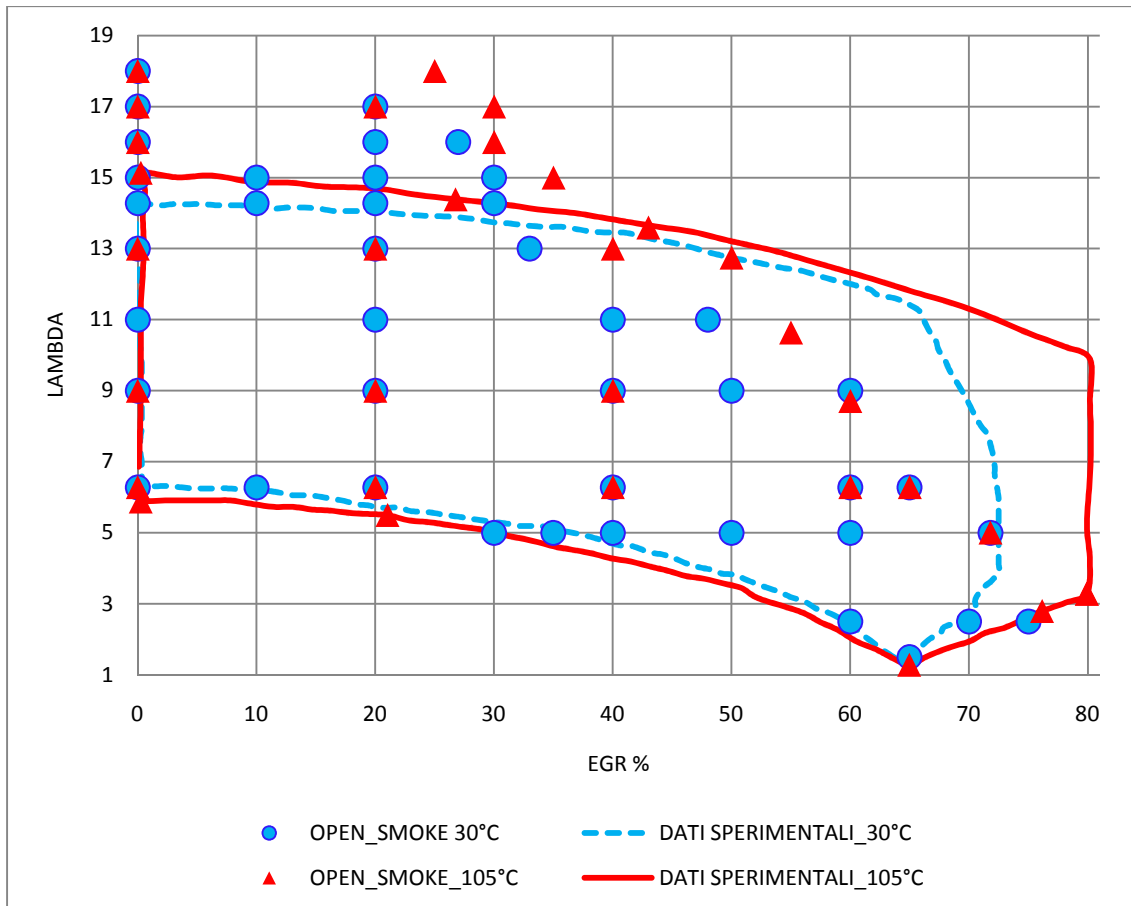


Grafico 5. 5: Confronto tra le due mappe di operabilità modellistiche e sperimentali

Osservando le mappe ottenute si può constatare innanzitutto l'estensione delle condizioni di operabilità per elevati valori di λ e bassi valori di EGR e, viceversa, la riduzione dell'area di operabilità in prossimità di alti valori di EGR e bassi λ . Tale risultato è dovuto alla non corretta stima della IMEP, la quale viene sottostimata per bassi valori di λ e sovrastimata per valori elevati. Questa affermazione è dimostrata dai grafici 5.6 e 5.7, i quali mostrano l'andamento della IMEP al variare di λ per le due condizioni di temperatura studiate e che sottolineano che, rispetto ai dati sperimentali, la IMEP determinata dal modello risente molto dell'influenza dell'EGR, diminuendo all'aumentare di questa, mentre sperimentalmente non si osserva alcuna influenza. La non corretta stima della IMEP è probabilmente figlia delle ipotesi fatte sulla temperatura di ammissione della miscela nel cilindro.

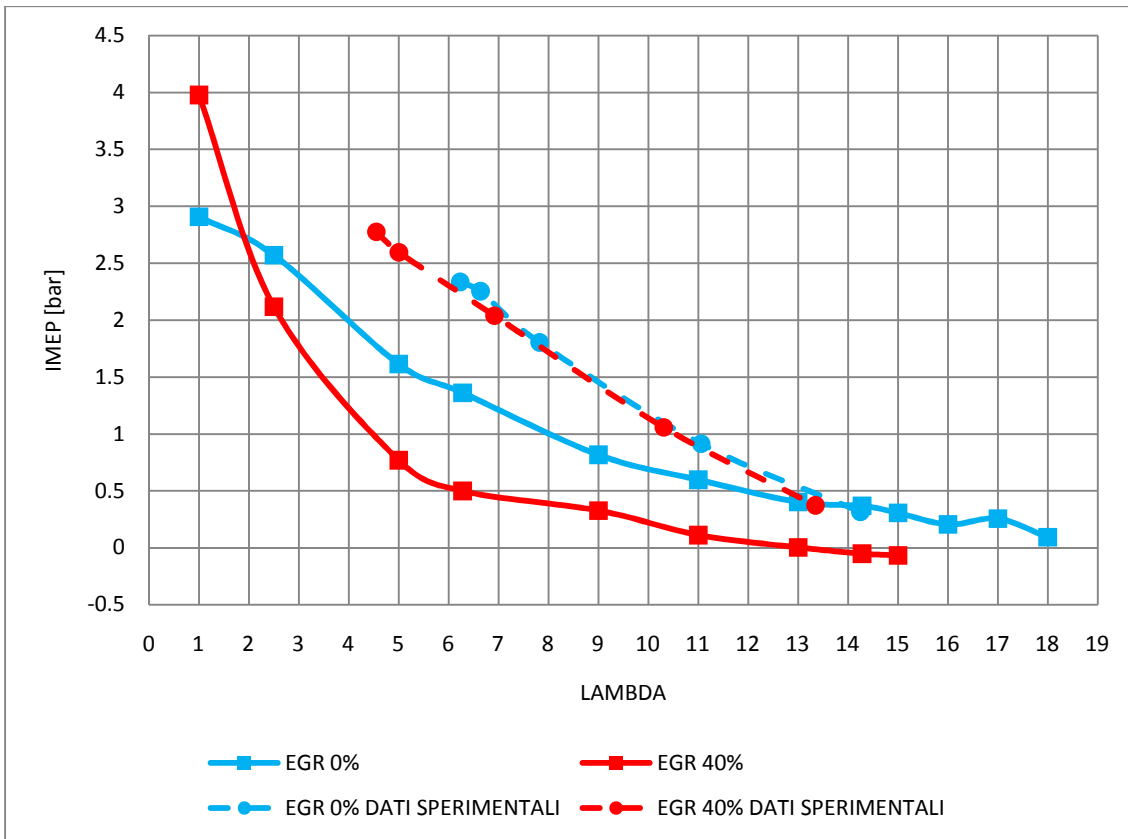


Grafico 5. 6: Confronto IMEP - Dati Sperimentali/Prove a 30°C

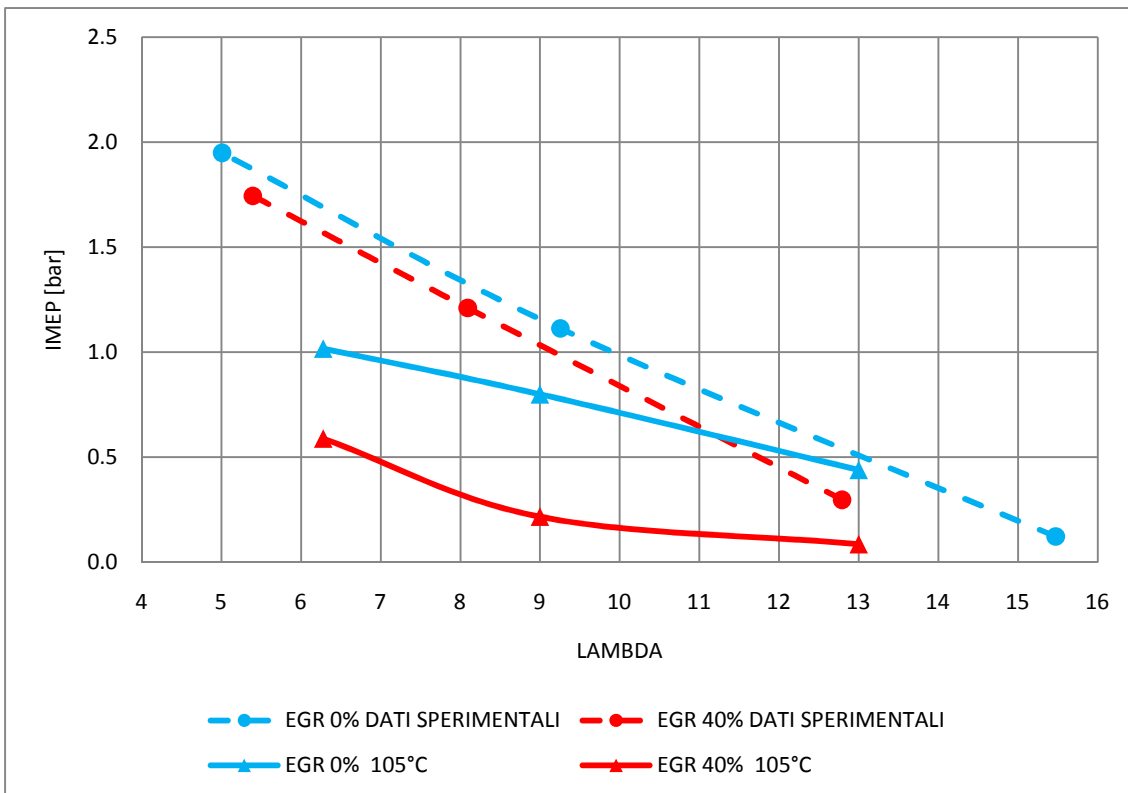


Grafico 5. 7: Confronto IMEP - Dati Sperimentali/Prove a 105°C

5.4. ALTRI CONFRONTI

Altri confronti con i dati sperimentali sono stati effettuati sull'inizio e la durata delle diverse fasi della combustione.

Nei grafici 5.8 e 5.9 è possibile osservare rispettivamente l'andamento dell'inizio e della durata della fase di combustione di bassa temperatura. Dal punto di vista modellistico il dato a cui si fa riferimento per caratterizzare la prima fase della combustione, è l'andamento della quantità di chetoidroperossido, molecola tipica coinvolta nelle reazioni di bassa temperatura, prodotto al variare dell'angolo di manovella (CAD). La sua produzione, infatti, inizia in corrispondenza dell'avvio della combustione e termina quando le temperature superano i 900 K. I confronti a 30 °C mostrano che, mentre sperimentalmente l'inizio della combustione non è assolutamente influenzato dai valori di λ ed EGR, i risultati prodotti dal modello ne risentono molto, in particolare si ha un ritardo sull'inizio della combustione man mano che la miscela si smagrisce e, a parità di λ , si registra lo stesso effetto aumentando la quantità di EGR. Osservando invece la durata della fase di combustione si nota come il risultato modellistico si allontana da quello sperimentale in maniera più decisa: in assenza di EGR la durata della bassa temperatura sembra diminuire all'aumentare di λ , mentre salendo con la quantità di EGR al 40% l'influenza della ricchezza della miscela tende a ridursi.

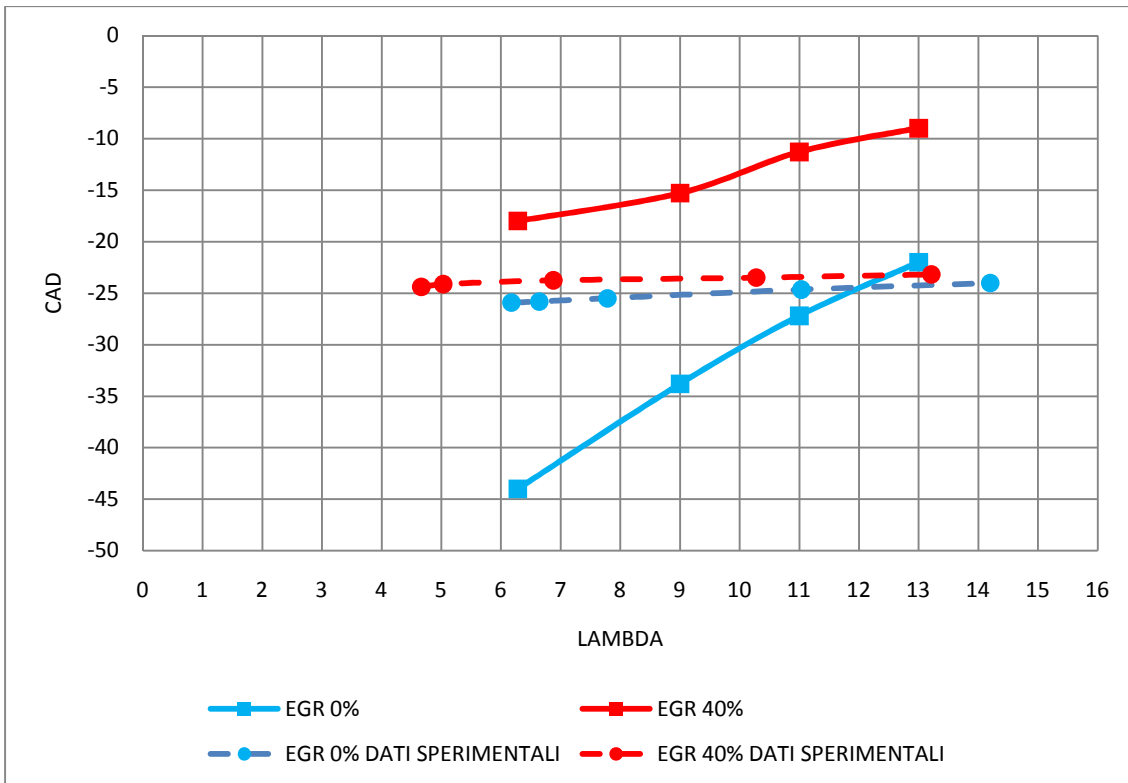


Grafico 5. 8: Confronto Inizio Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C

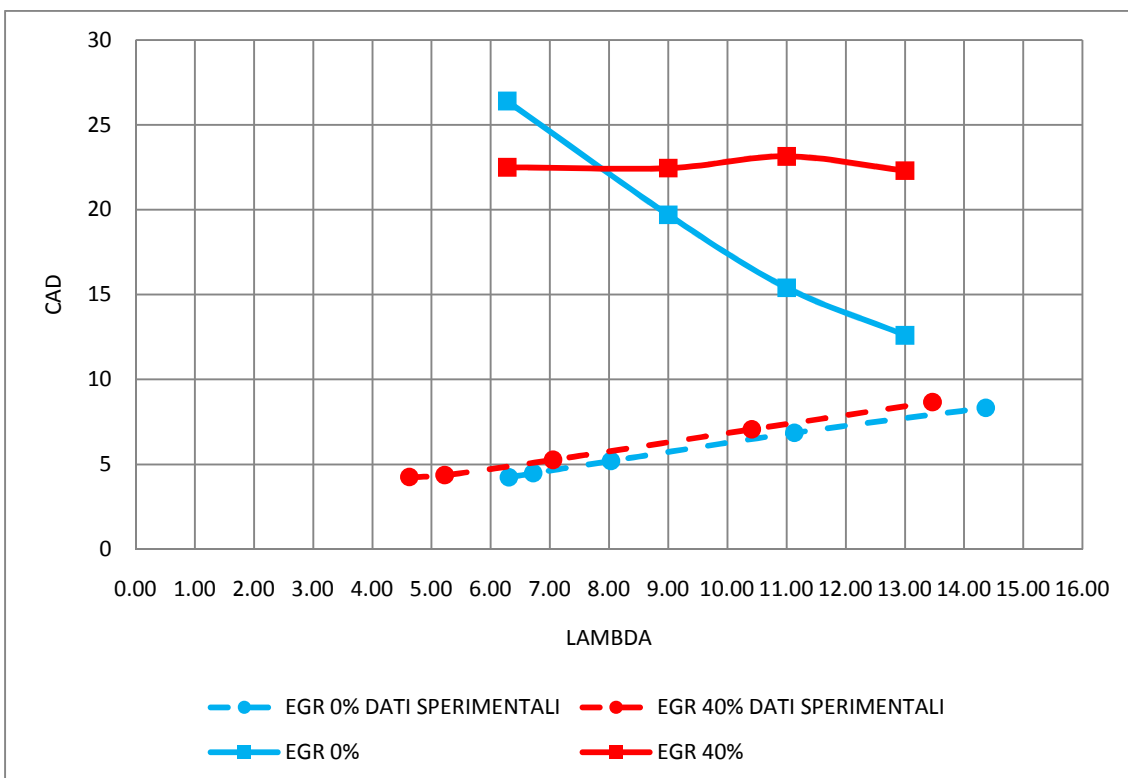


Grafico 5. 9: Confronto Durata Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C

Aumentando invece la temperatura della carica a 105°C si osserva dai grafici 5.10 e 5.11, una minore influenza della quantità di EGR sia sull'inizio che sulla durata della fase di bassa temperatura, rispetto ai dati a 30°C, ma comunque superiore rispetto ai dati sperimentali. Gli andamenti rimangono simili.

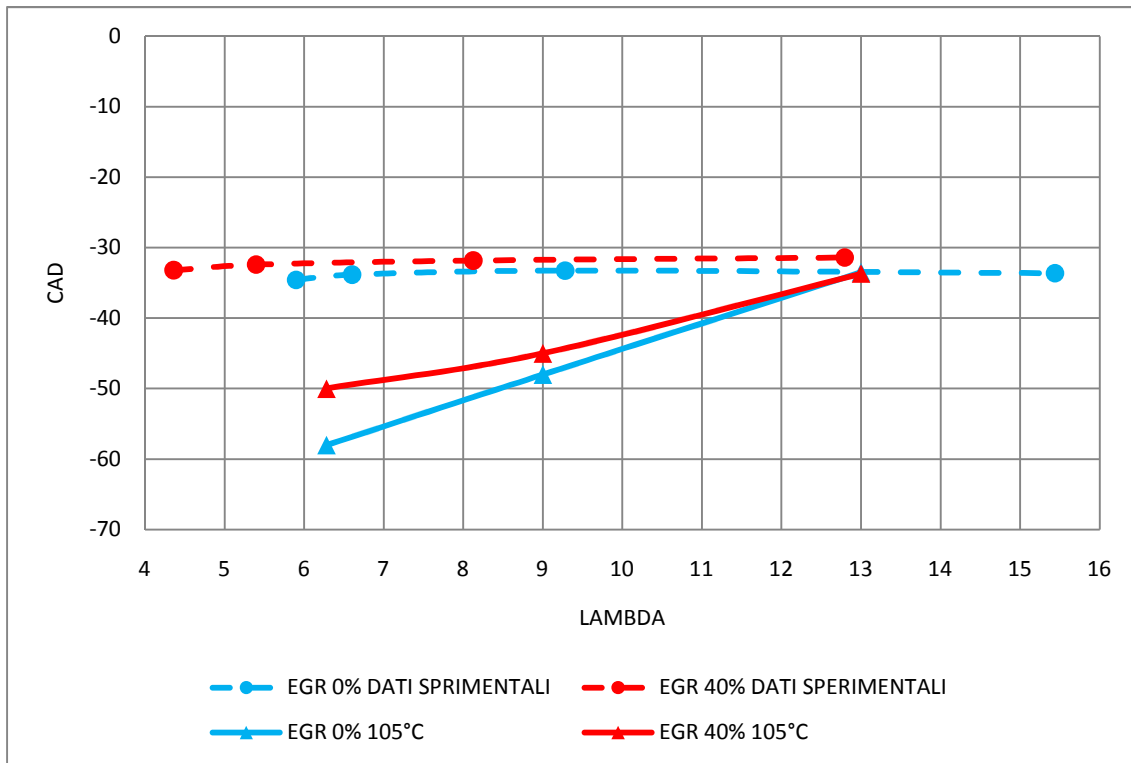


Grafico 5. 10: Confronto Inizio Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C

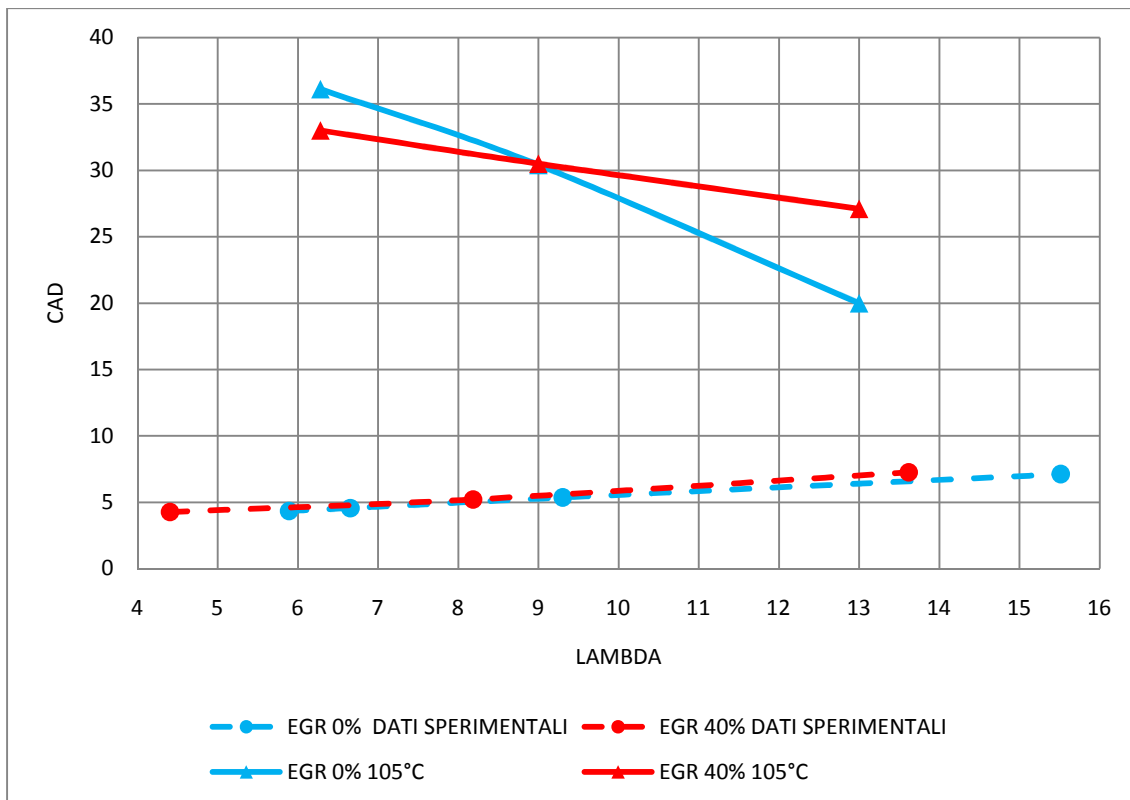


Grafico 5. 11: Confronto Durata Bassa Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C

Le evidenti discrepanze rispetto ai dati sperimentali potrebbero essere dovute a un numero di zone scelto per modellare il motore troppo basso e a una distribuzione di temperatura che non modella correttamente le disomogeneità all'interno del motore.

Lo stesso tipo di confronto è stato compiuto per la zona di alta temperatura. In questo caso l'inizio è stato determinato visualizzando l'andamento della velocità del calore rilasciato all'interno della camera, il quale presenta un deciso aumento dovuto al forte e improvviso incremento della temperatura caratteristico di tale fase. Per la durata invece si è monitorata la quantità di anidride carbonica, prodotto dell'ossidazione completa della miscela idrocarburica, la quale raggiunge il suo massimo una volta che tutto l'idrocarburo è stato bruciato.

Il confronto effettuato a temperatura di alimentazione pari a 30 °C (grafico 5.12 e 5.13)

mostra in questo caso una maggiore concordanza con i dati sperimentali. Per quanto riguarda l'inizio della fase si osserva in entrambe i casi una dipendenza dalla ricchezza della miscela e dall'EGR, anche se nei dati modellistici tale dipendenza è più marcata. Nel caso della durata invece gli andamenti sembrano simili, ma è evidente che il modello descrive una fase di alta temperatura di maggiore durata, dovuta sempre alle ipotesi fatte sulla modellazione multi-zona.

Per le prove a 105°C illustrate nei grafici 5.14 e 5.15 valgono le stesse considerazioni fatte per le prove a 30°C.

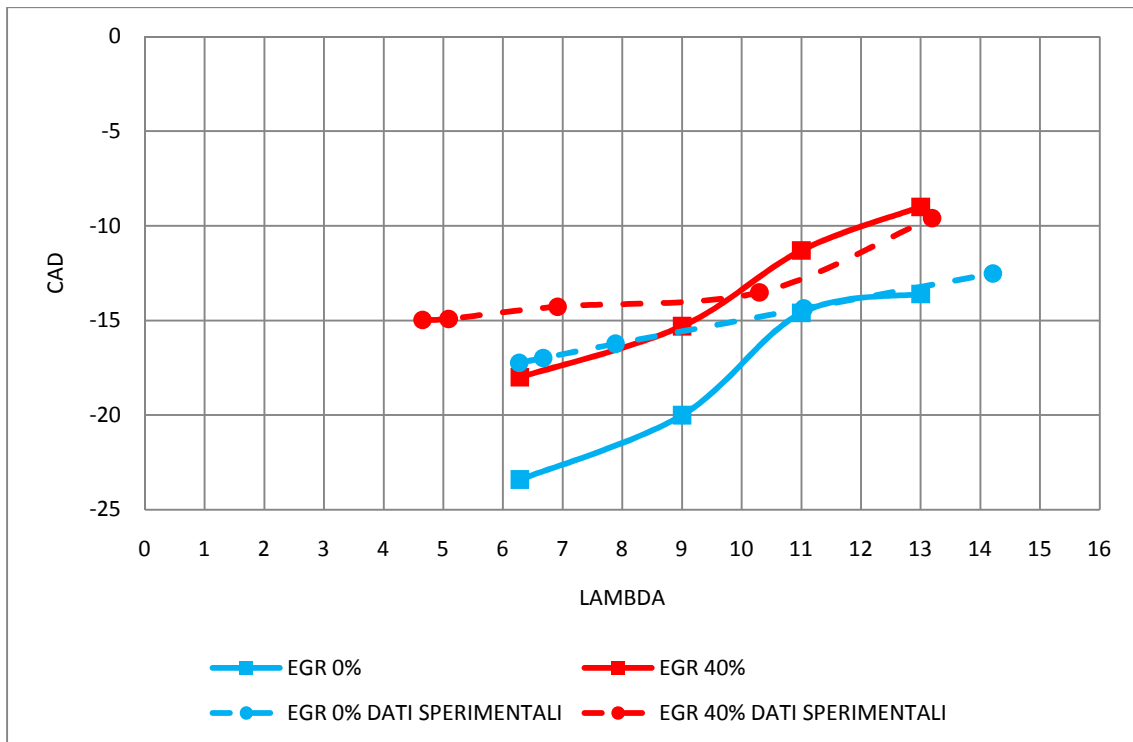


Grafico 5.12: Confronto Inizio Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C

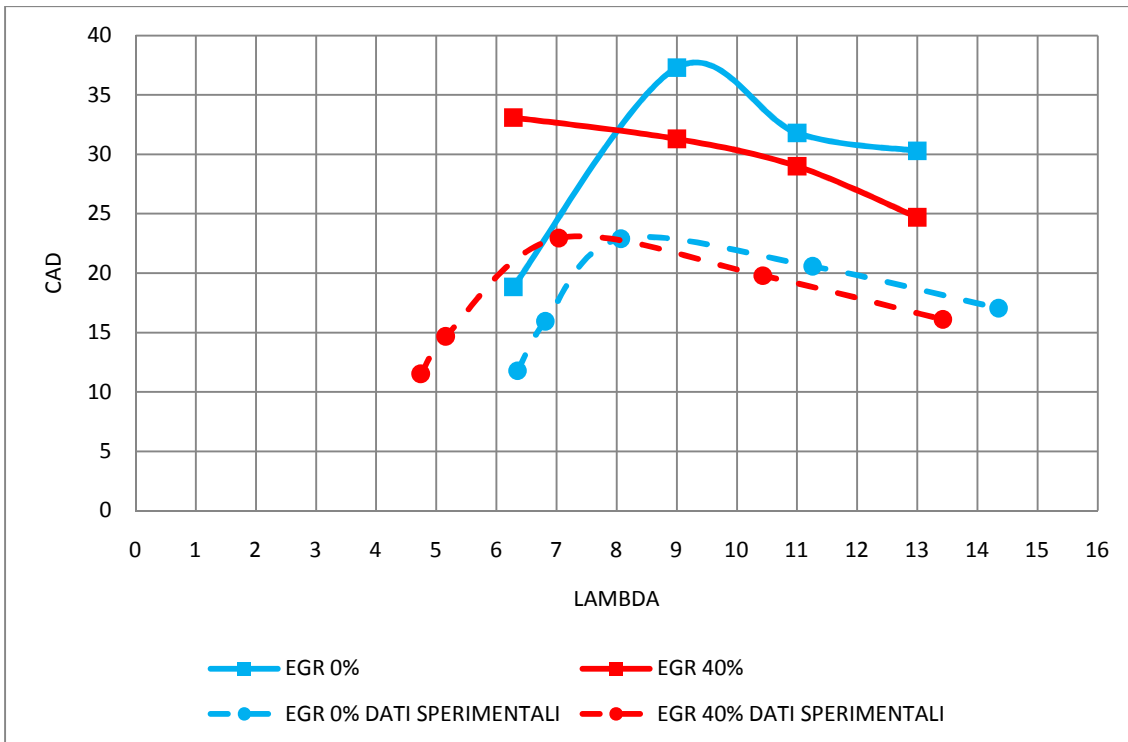


Grafico 5. 13: Confronto Durata Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 30°C

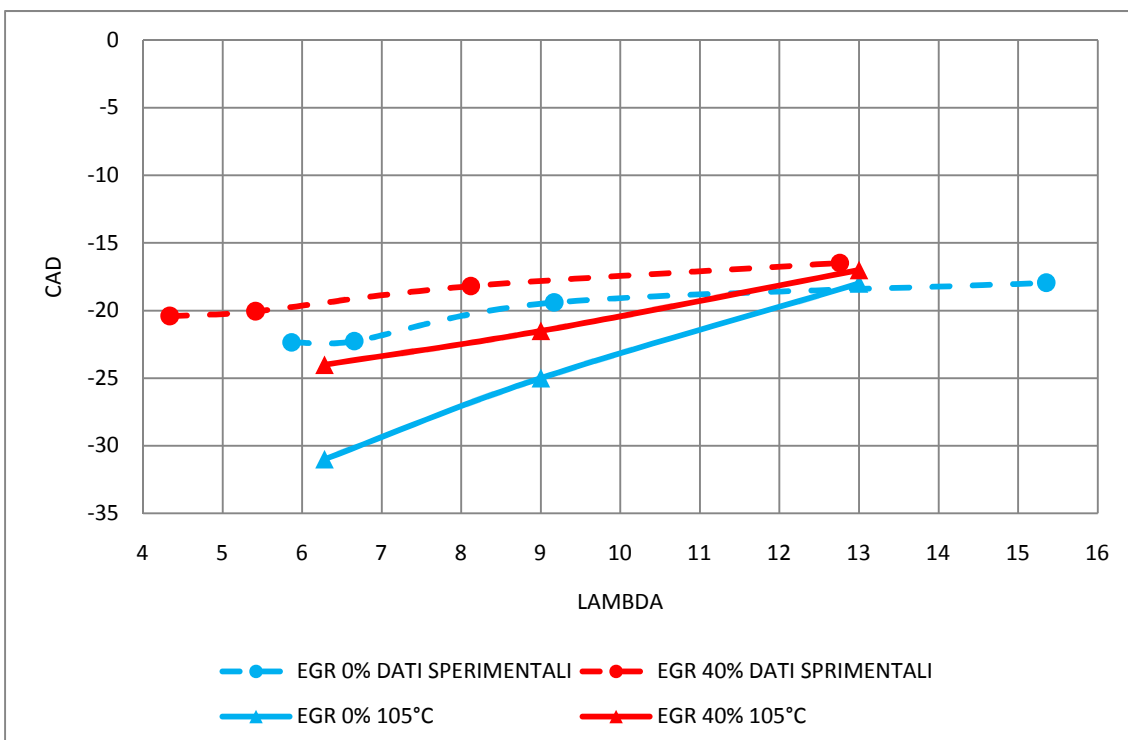


Grafico 5. 14: Confronto Inizio Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C

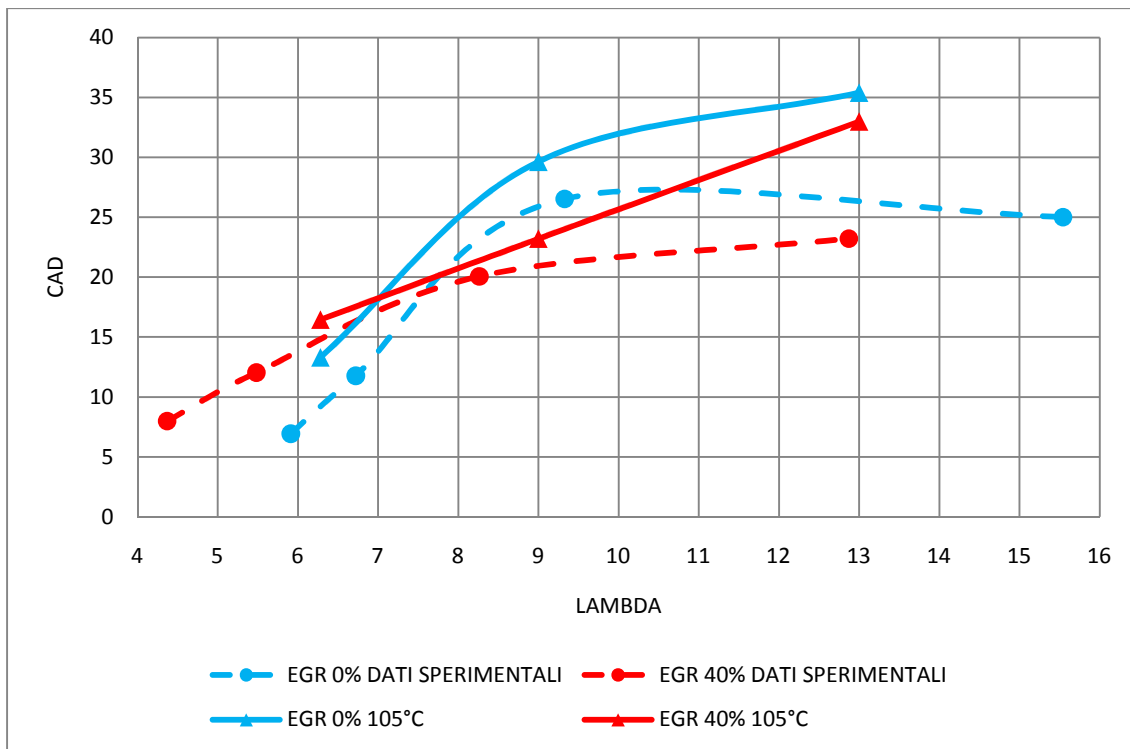


Grafico 5. 15: Confronto Durata Alta Temperatura - Dati Sperimentali/Prove a 105°C

Le misure effettuate sul motore da ricerca hanno permesso anche di analizzare l'andamento del calore rilasciato durante la fase di combustione della miscela. Sono state eseguite 4 prove in diverse condizioni di λ ed EGR mantenendo la temperatura di alimentazione a 105°C. I confronti sono mostrati nel grafico 5.16.

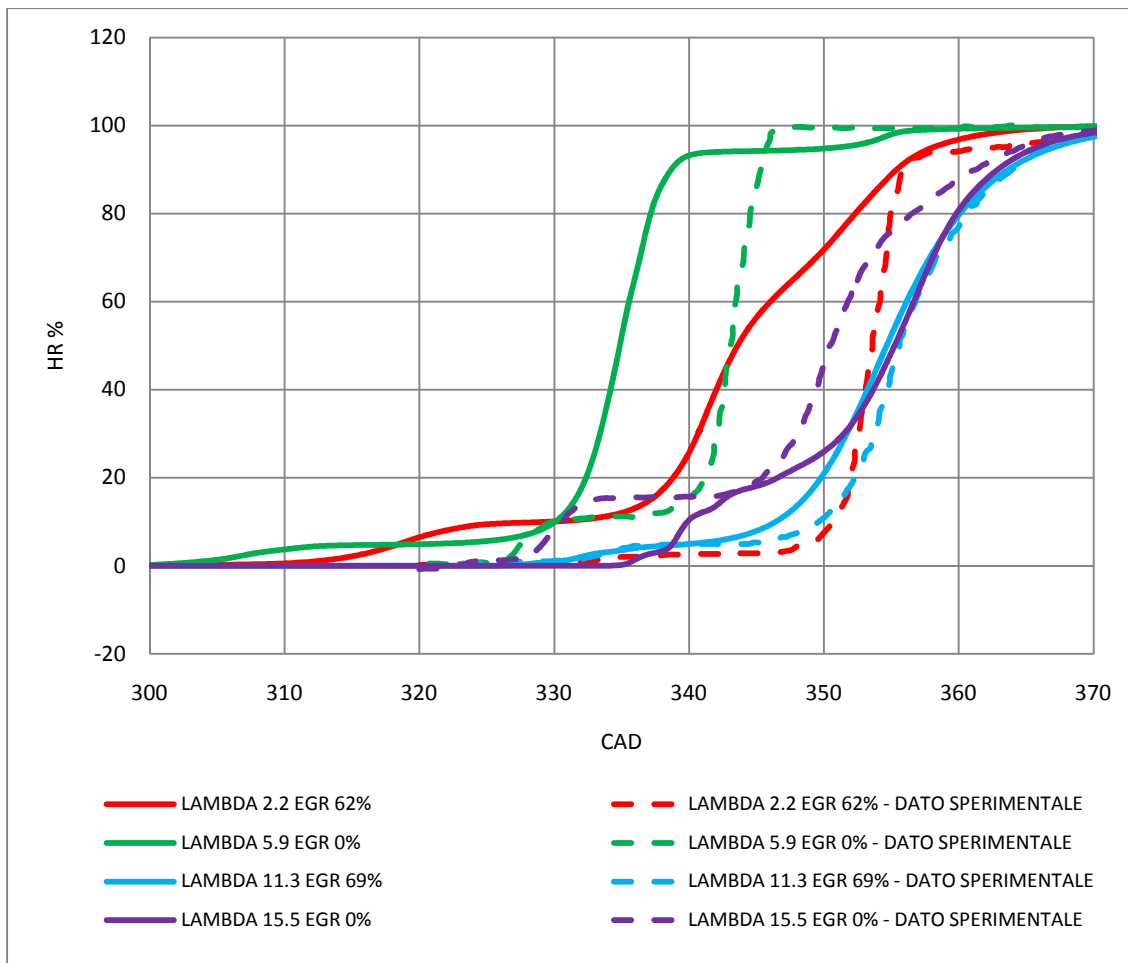


Grafico 5. 16: Confronto Calore Rilasciato Dati Sperimentali/Prove a 105°C

Tale confronto mette in evidenza nuovamente l'effetto dell'ipotesi fatta sulla temperatura di ammissione della carica, infatti, si può osservare come nelle due prove a bassi valori di λ (2.2 e 5.9), il motore simulato dal modello tenda a rilasciare calore notevolmente in anticipo rispetto a quanto sperimentalmente rilevato, e ciò a causa della sovrastima della temperatura di alimentazione. Nel caso a $\lambda = 11.3$ si registra invece una quasi perfetta concordanza, mentre salendo a $\lambda = 15.5$, si ha un'inversione dell'andamento dovuto alla sottostima della temperatura della carica che ritarda il rilascio di calore.

Per quanto riguarda l'emissione di inquinanti è stato effettuato un confronto in merito all'andamento della quantità di monossido di carbonio (CO), prodotto di combustione incompleta della miscela idrocarburica. Nella comparazione dei risultati derivanti dalle prove a 30°C (grafico 5.17) si può osservare una buona concordanza dei dati modellistici con quelli sperimentali: le quantità di CO

prodotte sono dello stesso ordine di grandezza e l'andamento parabolico è rispettato, anche se il modello tende a marcare molto di più la presenza di un massimo. Osservando invece le prove a 105°C (grafico 5.18) si può notare che il modello non risente di questo incremento di temperatura e produce una quantità di CO dello stesso ordine di grandezza delle prove a temperatura minore, e quindi decisamente inferiore rispetto ai dati sperimentali. E' stato verificato che la quantità di CO prodotta tende ad aumentare raffreddando il sistema a causa della mancanza di energia necessaria a completare la combustione della miscela, ma, per poter arrivare ai valori sperimentali, tale raffreddamento dovrebbe essere troppo deciso e quindi non ragionevole. Con il modello così strutturato non è quindi possibile produrre una quantità di CO così elevata.

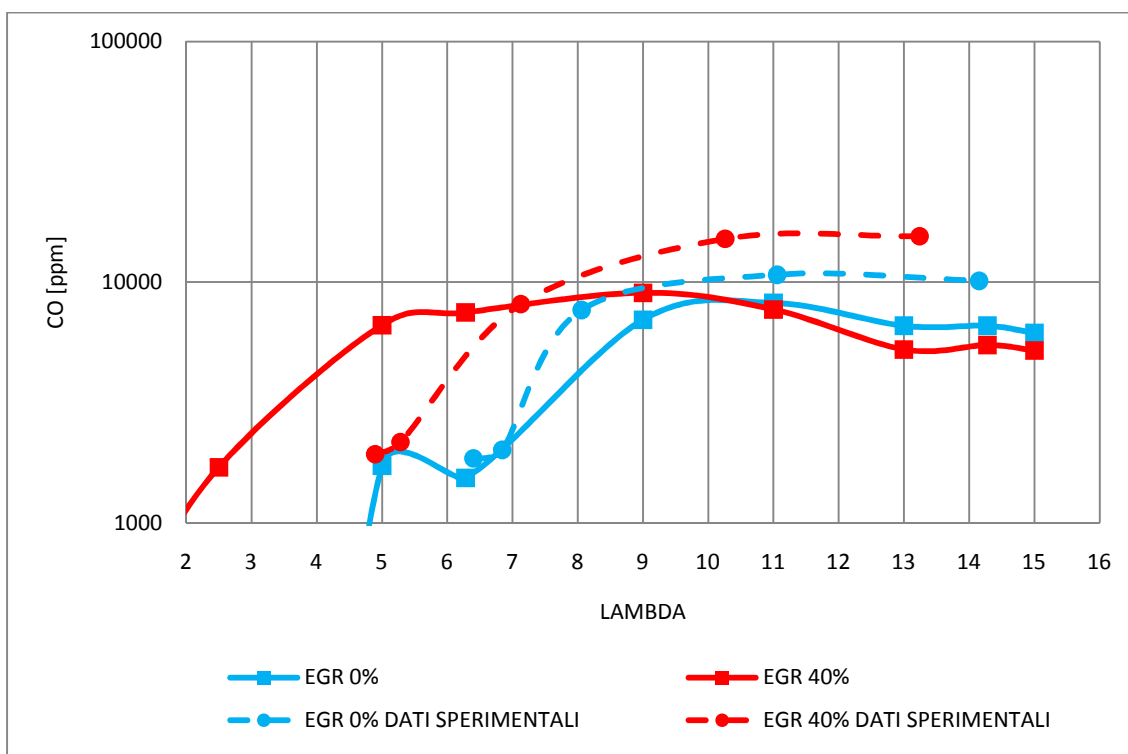


Grafico 5. 17: Confronto Produzione di CO Dati Sperimentali/Prove a 30°C

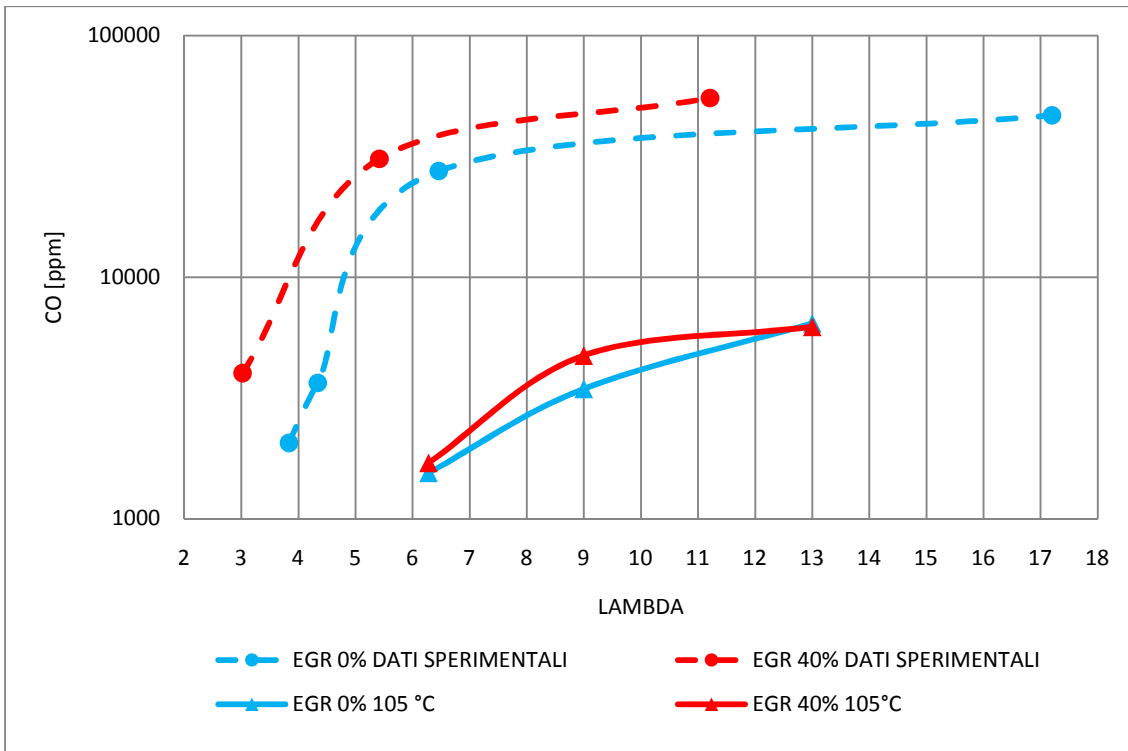


Grafico 5. 18: Confronto Produzione di CO Dati Sperimentali/Prove a 105°C

CAPITOLO 6

CONCLUSIONI

In questo lavoro si è cercato di caratterizzare la combustione di n-eptano in un motore a combustione omogenea HCCI, utilizzando un modello multi-zona e un meccanismo cinetico dettagliato. Per verificare la validità del modello utilizzato ci si è confrontati con dei dati sperimentali ottenuti da prove effettuate su un motore da banco.

Il confronto è stato effettuato su diverse variabili che caratterizzano la fase di combustione in un motore HCCI : temperatura massima raggiunta nel cilindro, pressione media effettiva indicata, inizio e durata delle fasi di alta e bassa temperatura, quantità di calore rilasciato e di monossido di carbonio prodotto. Inoltre è stato possibile costruire una mappa di operabilità del motore nelle diverse condizioni di λ e % di EGR.

Tenuto conto delle possibili incertezze sperimentali che influenzano i dati con cui ci si è confrontati, dall'osservazione dei risultati ottenuti si può concludere che il modello sembra adeguato per la simulazione di un motore HCCI nelle condizioni operative proposte, anche se è evidente che alcune delle ipotesi effettuate a causa della mancanza di alcune informazioni sperimentali e della semplificazione indispensabile dovuta al compromesso con i tempi di calcolo, possano essere ottimizzate. In particolare sembra necessario un aumento del numero di zone, la riduzione della variazione di temperatura della porzione di carica assegnata a ciascuna zona e un miglioramento dell'ipotesi fatta sulla temperatura di ammissione della carica.

APPENDICE A

Dati relativi alle emissioni inquinanti nel settore trasporti

I seguenti dati sono frutto di uno studio dell'EPA (United States Environmental Protection Agency) denominato "U.S. Inventory of Greenhouse Gas Emission and Sinks".

Essi fanno quindi riferimento alla sola area statunitense la quale però, per la sua estensione e densità di popolazione, può essere presa come riferimento per avere un'idea quantitativa del contributo del settore trasporti all'inquinamento a livello globale.

Tale studio, pubblicato nell'aprile 2008, riguarda il periodo che va dal 1990 al 2006.

Viene preso come inquinante di riferimento principale l'anidride carbonica, la quale è la maggior imputata all'aggravamento dell'effetto serra:

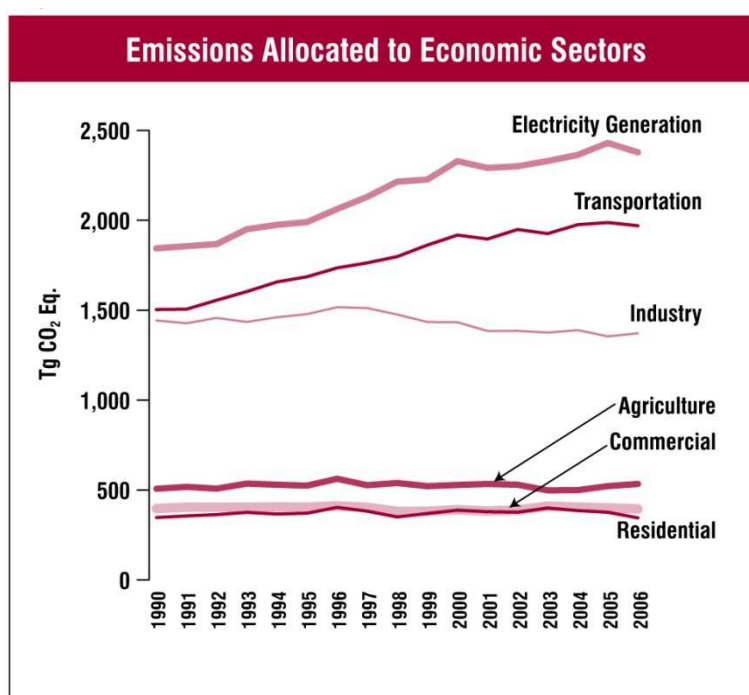


Figura APP.A 1: Emissioni di Gas serra per settore economico

La Figura APP.A 1 mostra in maniera evidente come il settore dei trasporti sia secondo solo a quello di generazione di elettricità per produzione di gas serra, e ben al di sopra rispetto all'industria. Nonostante tutti gli interventi effettuati

sugli automezzi negli ultimi anni il trend è in continuo aumento, probabilmente per l'aumento del numero di automezzo in circolazione.

Nella Tabella APP.A 1 invece è possibile trovare la quantificazione dei diversi tipi di gas facenti parte dei gas serra per diversi tipi di veicoli.

Questi dati mettendo in evidenza che, come noto, il principale gas serra per quantità è l'anidride carbonica e che la tipologia di mezzo che più contribuisce all'emissione di questi inquinanti sono le automobili, a cui seguono nell'immediato i mezzi pesanti.

Gas/Vehicle Type	1990	1995	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006
Passenger Cars	656.9	644.1	694.6	699.1	713.7	692.4	689.5	705.8	678.4
CO ₂	628.8	604.9	643.5	647.9	662.6	642.1	640.0	658.4	634.5
CH ₄	2.6	2.1	1.6	1.5	1.4	1.3	1.2	1.1	1.0
N ₂ O	25.4	26.9	25.2	23.8	22.5	21.0	19.5	17.8	15.6
HFCs	+	10.1	24.3	25.9	27.2	28.0	28.8	28.5	27.2
Light-Duty Trucks	336.2	434.7	508.1	513.3	525.1	560.4	583.0	544.0	556.6
CO ₂	320.7	405.0	466.0	470.3	483.2	518.8	540.8	501.9	514.9
CH ₄	1.4	1.4	1.1	1.1	0.9	0.8	0.7	0.7	0.7
N ₂ O	14.1	22.1	22.4	21.3	18.5	16.6	15.3	13.7	12.7
HFCs	+	6.1	18.6	20.6	22.5	24.2	26.1	27.7	28.3
Medium- and Heavy-Duty Trucks	228.6	272.5	344.3	343.6	357.9	354.4	367.4	395.2	404.6
CO ₂	227.8	271.2	341.5	340.6	354.8	351.2	364.1	391.9	401.3
CH ₄	+	+	+	+	+	+	+	+	+
N ₂ O	0.8	1.0	1.2	1.2	1.2	1.3	1.2	1.2	1.1
HFCs	+	0.3	1.6	1.7	1.8	1.9	2.1	2.1	2.2
Buses	8.5	9.3	11.2	10.3	10.0	10.8	15.1	12.1	12.5
CO ₂	8.3	9.0	10.9	10.0	9.6	10.5	14.7	11.8	12.1
CH ₄	0.2	0.2	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
N ₂ O	+	+	+	+	+	+	+	+	+
HFCs	+	+	0.1	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.3
Motorcycles	1.8	1.8	1.9	1.7	1.7	1.7	1.8	1.6	1.9
CO ₂	1.7	1.8	1.8	1.7	1.7	1.6	1.7	1.6	1.9
CH ₄	+	+	+	+	+	+	+	+	+
N ₂ O	+	+	+	+	+	+	+	+	+

Gas/Vehicle Type	1990	1995	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006
Commercial Aircraft—Domestic^a	138.1	144.6	165.9	154.4	147.6	145.4	144.4	152.0	143.6
CO ₂	136.7	143.1	164.2	152.9	146.1	143.9	142.9	150.4	142.1
CH ₄	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
N ₂ O	1.3	1.4	1.6	1.5	1.4	1.4	1.4	1.5	1.4
Other Aircraft—Domestic^b	43.8	31.9	32.6	34.1	32.2	31.1	34.5	31.1	28.8
CO ₂	43.3	31.5	32.2	33.7	31.9	30.8	34.1	30.8	28.5
CH ₄	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
N ₂ O	0.4	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3
Ships and Boats—Domestic^c	47.0	56.6	65.1	47.4	65.4	38.3	47.1	50.8	47.7
CO ₂	46.5	55.5	61.0	43.2	60.8	33.6	42.1	45.6	42.4
CH ₄	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
N ₂ O	0.4	0.4	0.5	0.3	0.5	0.3	0.4	0.4	0.4
HFCs	+	0.6	3.4	3.7	4.0	4.3	4.6	4.7	4.9
Rail	38.5	44.0	50.1	50.8	50.7	52.8	55.8	56.6	57.9
CO ₂	38.1	42.2	45.1	45.4	44.9	46.6	49.2	49.8	51.0
CH ₄	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
N ₂ O	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3	0.4	0.4	0.4
HFCs	+	1.4	4.6	5.0	5.4	5.8	6.1	6.4	6.5
Pipelines^d	36.1	38.2	35.2	33.6	36.6	32.7	31.2	32.3	32.4
CO ₂	36.1	38.2	35.2	33.6	36.6	32.7	31.2	32.3	32.4
Lubricants	11.9	11.3	12.1	11.1	10.9	10.1	10.2	10.2	9.9
CO ₂	11.9	11.3	12.1	11.1	10.9	10.1	10.2	10.2	9.9
Other Transportation (Unspecified)^e	+	+	+	+	+	0.1	0.1	0.2	0.2
Total Transportation	1,547.2	1,688.9	1,921.0	1,899.4	1,952.0	1,930.2	1,980.0	1,992.0	1,974.5
<i>International Bunker Fuels^f</i>	<i>114.8</i>	<i>101.6</i>	<i>102.2</i>	<i>98.6</i>	<i>90.0</i>	<i>104.6</i>	<i>120.2</i>	<i>123.8</i>	<i>128.4</i>

+ Does not exceed 0.05 Tg CO₂ Eq.

Note: Totals may not sum due to independent rounding. Emissions estimates for passenger cars, light-duty trucks and heavy-duty trucks are calculated using fuel consumption data from FHWA's Highway Statistics, which used an updated methodology to develop the 2006 estimates. In the most recent Highway Statistics, FHWA also updated 2005 fuel consumption estimates, but did not revise other prior years. This causes some discontinuity in the emissions estimates between 2004 and 2005.

Passenger cars and light-duty trucks include vehicles typically used for personal travel and less than 8,500 lbs; medium- and heavy-duty trucks include vehicles 8,501 lbs and above.

HFC emissions primarily reflect HFC-134a.

^a Consists of emissions from jet fuel consumed by domestic operations of commercial aircraft (no bunkers).

^b Consists of emissions from jet fuel and aviation gasoline consumption by general aviation and military aircraft.

^c Fluctuations in emission estimates are associated with fluctuations in reported fuel consumption, and may reflect data collection problems.

^d CO₂ estimates reflect natural gas used to power pipelines, but not electricity. While the operation of pipelines produces CH₄ and N₂O, these emissions are not directly attributed to pipelines in the U.S. Inventory.

^e Combination of gases; balancing item for transportation emissions not specifically identified in table but which are included in transportation economic sector emissions identified in Table 2-14.

^f Emissions from International Bunker Fuels include emissions from both civilian and military activities; these emissions are not included in the transportation totals.

Tabella APP.A 1: Emissioni di gas serra in relazione al tipo di veicolo (Tg CO₂ eq.)

Fuel/Vehicle Type	1990	1995	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006
Gasoline	982.8	1,038.9	1,135.7	1,145.4	1,172.3	1,176.5	1,194.8	1,181.2	1,170.0
Passenger Cars	621.0	597.0	639.9	644.2	658.9	638.0	635.8	654.2	630.4
Light-Duty Trucks	308.9	389.9	446.0	449.4	461.3	491.5	511.6	476.0	488.0
Medium- and Heavy-Duty Trucks ^b	38.7	35.8	36.0	35.0	35.5	30.6	30.9	34.7	35.2
Buses	0.3	0.4	0.4	0.4	0.3	0.3	0.4	0.4	0.4
Motorcycles	1.7	1.8	1.8	1.7	1.7	1.6	1.7	1.6	1.9
Recreational Boats	12.1	14.1	11.6	14.6	14.6	14.5	14.4	14.3	14.1
Distillate Fuel Oil (Diesel)	272.7	325.1	401.0	401.6	415.1	421.8	447.2	462.2	472.1
Passenger Cars	7.8	7.7	3.6	3.6	3.7	4.2	4.3	4.2	4.1
Light-Duty Trucks	11.3	14.7	19.8	20.6	21.6	26.9	28.8	25.5	26.4
Medium- and Heavy-Duty Trucks ^b	188.3	234.9	305.1	305.1	318.8	320.0	332.5	356.5	365.4
Buses	7.9	8.6	10.1	9.2	8.7	9.4	13.4	10.6	10.9
Rail	35.1	39.2	41.7	41.8	41.5	42.4	44.7	45.1	46.0
Recreational Boats	1.9	2.3	2.7	2.8	2.9	3.0	3.0	3.1	3.205
Ships and Other Boats	8.8	8.6	11.7	13.2	12.8	8.3	10.0	7.9	7.4
Ships (Bunkers)	11.6	9.2	6.3	5.3	5.1	7.6	10.5	9.3	8.7
Jet Fuel	222.6	222.1	253.8	242.8	236.8	231.5	239.8	246.3	239.5
Commercial Aircraft–Domestic	136.7	143.1	164.2	152.9	146.1	143.9	142.9	150.4	142.1
Military Aircraft	33.9	23.5	20.5	22.5	20.4	19.9	20.4	16.9	14.8
General Aviation Aircraft	6.3	5.3	9.2	8.8	9.1	8.8	11.5	11.4	11.4
Aircraft (Bunkers)	45.7	50.2	59.9	58.7	61.1	58.8	64.9	67.5	71.1
Aviation Gasoline	3.1	2.7	2.5	2.4	2.3	2.1	2.2	2.4	2.3
General Aviation Aircraft	3.1	2.7	2.5	2.4	2.3	2.1	2.2	2.4	2.3
Residual Fuel Oil	80.1	71.7	69.9	46.1	53.3	45.0	58.3	66.0	64.9
Ships and Other Boats ^c	23.7	30.5	34.9	12.6	30.5	7.8	14.7	20.2	17.7
Ships (Bunkers) ^c	56.4	41.2	35.0	33.6	22.8	37.2	43.6	45.8	47.2
Natural Gas	36.1	38.4	35.7	34.1	37.2	33.4	32.0	33.2	33.2
Passenger Cars	+	0.1	+	+	+	+	+	+	+
Light-Duty Trucks	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Buses	+	0.1	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.8	0.8
Pipeline	36.1	38.2	35.2	33.6	36.6	32.7	31.2	32.3	32.4
LPG	1.4	1.1	0.7	0.8	0.8	1.0	1.1	1.1	1.1
Light-Duty Trucks	0.5	0.5	0.3	0.3	0.3	0.4	0.4	0.4	0.4
Medium- and Heavy-Duty Trucks ^b	0.8	0.5	0.4	0.5	0.5	0.6	0.7	0.6	0.6
Buses	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Electricity	3.0	3.0	3.4	3.6	3.4	4.2	4.5	4.7	4.9
Rail	3.0	3.0	3.4	3.6	3.4	4.2	4.5	4.7	4.9
Total (Including Bunkers)^d	1,601.8	1,703.1	1,902.7	1,876.8	1,921.4	1,915.4	1,979.8	1,997.1	1,988.1
Total (Excluding Bunkers)^d	1,488.1	1,602.5	1,801.6	1,779.2	1,832.3	1,811.8	1,860.9	1,874.5	1,861.0

Note: Totals may not sum due to independent rounding. Emissions estimates for passenger cars, light-duty trucks, and heavy-duty trucks are calculated using fuel consumption data from FHWA's *Highway Statistics*, which used an updated methodology to develop the 2005 and 2006 estimates. This causes some discontinuity in the emissions estimates for gasoline and diesel on-road vehicles between 2004 and 2005.

^aThis table does not include emissions from non-transportation mobile sources, such as agricultural equipment and construction/mining equipment; it also does not include emissions associated with electricity consumption by pipelines or lubricants used in transportation.

^bIncludes medium- and heavy-duty trucks over 8,500 lbs.

^cFluctuations in emission estimates from the combustion of residual fuel oil are associated with fluctuations in reported fuel consumption and may reflect data collection problems.

^dOfficial estimates exclude emissions from the combustion of both aviation and marine international bunker fuels; however, estimates including international bunker fuel-related emissions are presented for informational purposes.

+ Less than 0.05 Tg CO₂ Eq.

Tabella APP.A 2: Emissione di gas serra in relazione al tipo di combustibile utilizzato e al settore di utilizzo (Tg CO₂ eq.)

La Tabella APP.A 2 mostra invece il contributo inquinante dei vari tipi di combustibili utilizzati nel settore dei trasporti. E' evidente che le benzine contribuiscono in maniera notevolmente più rilevante rispetto a tutti gli altri idrocarburi all'emissione di gas serra. Da questo punto di vista l'alimentazione a gasolio sembrerebbe preferibile.

Oltre all'anidride carbonica, avente un contributo diretto sull'effetto serra, esistono molti altri gas che indirettamente contribuiscono a tale fenomeno, essi sono principalmente il monossido di carbonio, gli ossidi di azoto e zolfo e composti organici volatili non - CH₄ (NMVOCs).

Anche in questo caso è possibile osservare dalla Tabella APP.A 3 come il settore trasporti sia sempre nei primissimi posti per quantità di emissione.

Dopo l'anidride carbonica, il gas serra più abbondante è il monossido di carbonio, derivante dalla combustione incompleta dei carburanti, a cui seguono gli ossidi di azoto e i composti aromatici. E' proprio per limitare l'emissione di questi tipi di inquinanti che ricercatori e case automobilistiche stanno cercando nuove soluzioni tecnologiche, infatti, si può notare che il trend è in discesa rispetto ai primi anni '90.

Gas/Activity	1990	1995	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006
NO_x	21,645	21,272	19,203	18,410	17,938	17,043	16,177	15,569	14,869
Mobile Fossil Fuel Combustion	10,920	10,622	10,310	9,819	10,154	9,642	9,191	8,739	8,287
Stationary Fossil Fuel Combustion	9,883	9,821	8,002	7,667	6,791	6,419	6,004	5,853	5,610
Industrial Processes	591	607	626	656	534	528	524	519	515
Oil and Gas Activities	139	100	111	113	321	316	316	316	315
Municipal Solid Waste Combustion	82	88	114	114	98	97	97	97	97
Agricultural Burning	28	29	35	35	33	34	39	39	38
Solvent Use	1	3	3	3	5	5	5	5	5
Waste	0	1	2	2	2	2	2	2	2
CO	130,461	109,032	92,777	89,212	84,609	80,221	76,342	72,365	68,372
Mobile Fossil Fuel Combustion	119,360	97,630	83,559	79,851	75,421	71,038	67,096	63,154	59,213
Stationary Fossil Fuel Combustion	5,000	5,383	4,340	4,377	4,965	4,893	4,876	4,860	4,844
Industrial Processes	4,125	3,959	2,217	2,339	1,744	1,724	1,724	1,724	1,724
Municipal Solid Waste Combustion	978	1,073	1,670	1,672	1,439	1,437	1,437	1,437	1,437
Agricultural Burning	691	663	792	774	709	800	879	860	825
Oil and Gas Activities	302	316	146	147	323	321	321	321	322
Waste	1	2	8	8	7	7	7	7	7
Solvent Use	5	5	46	45	1	1	1	1	1
NMVOCs	20,930	19,520	15,228	15,048	15,640	15,170	14,807	14,444	14,082
Mobile Fossil Fuel Combustion	10,932	8,745	7,230	6,872	7,235	6,885	6,587	6,289	5,991
Solvent Use	5,216	5,609	4,384	4,547	3,881	3,862	3,854	3,846	3,839
Industrial Processes	2,422	2,642	1,773	1,769	2,036	1,972	1,931	1,890	1,849
Stationary Fossil Fuel Combustion	912	973	1,077	1,080	1,585	1,560	1,553	1,545	1,538
Oil and Gas Activities	554	582	389	400	545	538	533	528	523
Municipal Solid Waste Combustion	222	237	257	258	243	239	237	235	232
Waste	673	731	119	122	115	114	112	111	110
Agricultural Burning	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
SO₂	20,935	16,891	14,829	14,452	13,403	13,631	13,232	13,114	12,258
Stationary Fossil Fuel Combustion	18,407	14,724	12,848	12,461	11,613	11,956	11,625	11,573	10,784
Industrial Processes	1,307	1,117	1,031	1,047	850	804	800	797	793
Mobile Fossil Fuel Combustion	793	672	632	624	683	621	564	508	451
Oil and Gas Activities	390	335	286	289	233	226	220	213	207
Municipal Solid Waste Combustion	38	42	29	30	23	22	22	22	22
Waste	0	1	1	1	1	1	1	1	1
Solvent Use	0	1	1	1	0	0	0	0	0
Agricultural Burning	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA

Source: (EPA 2008, disaggregated based on EPA 2003) except for estimates from field burning of agricultural residues.

NA (Not Available)

Note: Totals may not sum due to independent rounding.

Tabella APP.A 3: Emissioni di NO_x, CO, NMVOCs e SO₂ in relazione a diverse attività (Gg)

BIBLIOGRAFIA

- Aceves, M., & Flowers, D. (2001). A Sequential Fluid-Mechanic Chemical-Kinetic Model of Propane HCCI Combustion. *SAE paper 2001-01-1027*.
- Aceves, S., Flowers, D., Martinez-Frias, J., Espinoza-Loza, F., Christensen, M., Johansson, B., et al. (2005). Analysis of the Effect of Geometry Generated Turbulence on HCCI Combustion by Multi-Zone Modeling. *SAE paper 2005-01-2134*.
- Agakawa H., M. T. (1999). Approaches to solve problem of the premixed lean diesel combustion. *SAE paper 199-01-0183*.
- Allen J., L. D. (2002). Variable valve actuated controlled auto-ignition: speed load maps and strategic regimes of operation. *SAE paper 2002-01-0422*.
- Amneus, P., Nilsson, D., Mauss, F., Christensen, M., & Johansson, B. (1998). HCCI Engine: Experiments and Detailed Kinetic Calculation. *COMODIA'98, Japan Society of Mechanical Engineers*, 567-572.
- Buzzi-Ferraris, G. (n.d.). *Numerical Libraries in C++*. Retrieved from Politecnico di Milano: <http://www.chem.polimi.it/homes/gbuzzi>
- Buzzi-Ferraris, G., & Manca, D. (1998). A New C++ Class for the Solution of Stiff and Non Stiff Ordinary Differential Equation Systems. *Computers Chem. Eng.*, 22(11) 1595-1621.
- *CHEMKIN-PRO - Theory Manual*. (2008).
- Chen, Z. (2000). Experimental study of CI natural gas/DME homogeneous charge engine. *SAE paper 200-01-0329*.
- Christensen, M. (1999). Demonstrating the multifuel capability of homogeneous charge compression ignition engine with variable compression ratio. *SAE paper 1999-01-3679*.
- Christensen, M. (1999). Homogeneous charge compression ignition with water injection. *SAE paper 199-01-0182*.
- Christensen, M., Johansson, B., Amneus, P., & Mauss, F. (2000). Supercharged HCCI Engine. *SAE paper 200-01-0327*.
- Ferrari, G. (2008). *Motori a combustione interna*. Il Capitello.

- Fiveland, S., & Assanis, D. (2001). Development of a Two-Zone HCCI Combustion Model Accounting for Boundary Layer Effects. *SAE paper 2001-01-1028* .
- Frassoldati, A., Faravelli, T., & Ranzi, E. (2003). Kinetic modeling of the interactions between NO and hydrocarbons in the oxidation of hydrocarbons at low temperatures. *Combustion and Flame* , Volume 132, Issue:1-2, pp.188-207.
- Furutani, M. (1998). An ultra-lean premixed compression ignition engine concept and its characteristics. *Proceedings of COMODIA'98* , 173-177.
- Gray A.W., R. I. (1997). Homogenous charge compression ignition /HCCI) of diesel fuel. *SAE paper 971676* .
- Gussak, L., & altri. (1975). The application of LAG-process in prechamber engines. *SAE paper 750890* .
- Hiraya, K. (2002). A study on gasoline fuelled compression ignition engine - a trail of operation region expansion. *SAE paper 2002-01-0416* .
- Honda. (1997). Honda readies activated radical combustion two-stroke engine for production motorcycle. *Automotive Engineer* , 90-92.
- Kaneko N., A. H. (2002). Expansion of the operating range with in-cylinder water injection in a premixed charge compression ignition time. *SAE paper 2002-01-1743* .
- Kimura S., A. O. (199-01-3681). New Combustion Concept for Ultr-Clean and High-Efficiency Small DI Diesel Engine. *SAE paper* , 1999.
- Komninos, N., Hountalas, D., & Kouremenos, D. (2004). Developmente of a New Multi-Zone Model for the Description of Physical Processes in HCCI Engines. *SAE paper 2004.01.0562* .
- Kraft, M., Maigaard, P., Mauss, F., Christensen, M., & Johansson, B. (2000). Investigation of Combustion Emission in a homogeneous Charge Compression Injection Engine: Measurements and a New Computational Model. *Proceedings of the Combustion Institute* , Volume 28, pag.1195-1202.
- Maigaard, P., Mauss, F., & Kraft, M. (2003). Homogeneous Charge Compression Ignition Engine: A Simulation on the Effects of

- Inhomogeneities. *Journal of Engineering of Gas Turbines and Power* , vol.125 pag. 466-471.
- Marriott C.D., R. R. (2002). Experimental Investigation of Direct Injection Gasoline for Premixed Compression Ignited Combustion Phasing Control. *SAE paper 2002-01-0418* .
 - Mase Y., K. J. (1998). Nissan's new multivalve DI diesel engine series. *SAE paper 981039* .
 - Mehl, M. (2007). PhD Thesis . *Autoignition Mechanisms in Internal Combustion Engine* .
 - Mehl, M., Tardani, A., Faravelli, T., Ranzi, E., D'Errico, G., Lucchini, T., et al. (2007). A Multizone approach to the detailed kinetic modeling of HCCI combustion. *SAE paper* .
 - Najt P.M., F. D. (1983). Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion. *SAE paper 830264* .
 - Nishijima Y., A. Y. (2002). Impingement spray system with direct water injection for premixed lean Diesel combustion control. *SAE paper 2002-01-0109* .
 - Noguchi M., T. Y. (1979). A study on gasoline engine combustion by observation of intermediate reactive products during combustion. *SAE paper 790840* .
 - Onishi S., H. J. (1979). Active thermo-atmosphere combustion (ATAC) - A new combustion process for internal combustion engines'. *SAE paper 790507* .
 - R.H., T. (1989). Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines. *SAE paper 892068* .
 - Ranzi, E., Faravelli, T., Gaffuri, P., Sogaro, A., D'Anna, A., & Ciajolo, A. (1997). A Wide-Range Modeling Study of Iso-Octane Oxidation. *Combustion and Flame* , 24-42.
 - Ranzi, E., Gaffuri, P., Faravelli, T., & Dagaut, P. (1995). A Wide Range Modeling Study of n-Heptane Oxidation. *Combustion and Flame* , 91-106.

- Ricklin, P. (2002). The effects of NO_x addition on the auto-ignition behaviour of natural gas under HCCI conditions. *SAE paper 2002-01-1746* .
- Willand, J. (1998). The Knocking Syndrome - Its Cure and ITs Potential. *SAE paper 982483* .
- Yoshizawa, K., Teraji, A., Miyakubo, H., & Urushihara, T. (n.d.). Study of High Load Operation Limit Expansion for Gasoline Compression Ignition Engines.
- Zhao, H. (2007). *HCCI and CAI engines for the automotive industry*. CRC Press LLC.