

POLITECNICO DI MILANO

Facoltà di Ingegneria Industriale e dell'Informazione
Dipartimento di Energia

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Meccanica



Sviluppo e validazione di un modello CFD per la simulazione del processo di iniezione di soluzioni acqua/urea nei sistemi di scarico di motori a CI

Relatore: Prof. Gianluca MONTENEGRO

Tesi di Laurea di:

Salvatore Auriemma Matr. 764912

Anno Accademico 2012-2013

Indice

1	Introduzione	1
1.1	Principali inquinanti dei motori Diesel	1
1.2	Tecniche di abbattimento degli inquinanti nei motori Diesel . .	2
1.2.1	Sistemi SNCR/SCR	2
2	Equazioni dello stato gassoso	5
2.1	Leggi costitutive	5
2.1.1	Legge di Newton	6
2.1.2	Legge di Fourier	6
2.1.3	Legge di Fick	7
2.1.4	Equazioni di stato	7
2.2	Equazioni di Conservazione	7
2.2.1	Equazione di conservazione della massa	8
2.2.2	Equazione di conservazione delle specie chimiche	9
2.2.3	Equazione di conservazione della quantità di moto	9
2.2.4	Equazione di conservazione dell' energia	10
2.3	Equazioni di Navier-Stokes	10
2.4	Turbolenza	12
2.4.1	Caratteristiche della turbolenza	13
2.4.2	Equazioni della Turbolenza	16
2.4.3	Modelli di chiusura	18
3	Equazioni dello spray	23
3.1	Equazione della massa della goccia	23
3.2	Equazione di moto della goccia	25
3.3	Equazione dell'energia della goccia	27
3.4	Modelli di atomizzazione	28
3.5	Modelli di Break-up	29
4	Evaporazione dell'UWS: Modellazione	33
4.1	Fase liquida	34
4.1.1	Rapid Mixing Model (RM Model)	34

4.1.2	Diffusion Limit Model (DL model)	34
4.1.3	Effective Diffusion Model (ED Model)	35
4.1.4	Modello scelto	35
4.2	Fase gassosa	37
4.3	Decomposizione termica dell'UREA	37
4.4	Modello di cristallizzazione	39
5	Implementazione	41
5.1	Metodo ai volumi finiti	42
5.2	Metodo della rappresentazione lagrangiana	44
5.2.1	Tracking	45
5.3	Il software OpenFOAM	47
5.3.1	Proprietá dell'UREA	48
5.3.2	Proprietá dell'UWS	50
6	Validazione del modello	53
6.1	Validazione del modello di evaporazione di singola goccia di AdBlue	53
6.1.1	Dati sperimentali	54
6.1.2	Validazione modello nel caso di evaporazione di singola goccia di AdBlue	56
6.2	Validazione spray	60
6.2.1	Validazione modello di evaporazione: ambiente quiescente	60
6.2.2	Validazione modello di evaporazione: flusso in moto	69
	Conclusioni	77
7	Appendice	79
7.1	Implementazione nel codice	79
	Bibliografia	84
	Lista dei simboli	88

Elenco delle figure

2.1	Flusso laminare/turbolento	12
2.2	Oscillazioni di una componente del vettore velocità intorno al suo valore medio	13
2.3	Scale Kolmogorov	14
3.1	Deformazione delle gocce a causa delle Forze Aerodinamiche	27
3.2	Esempi di regimi di Breakup	29
3.3	Rappresentazione schematica dell'instabilità del meccanismo di KH	30
4.1	Temperatura goccia di H_2O	36
4.2	Temperatura goccia di UWS	36
4.3	Possibili schematizzazione circa la decomposizione dell'UREA	38
4.4	Goccia di UWS prima (sin) e dopo (dex) la dissoluzione	39
5.1	Cella di calcolo metodo ai volumi finiti	42
5.2	Instabilità dell'algoritmo LF dovuto ad un time step eccessivo	46
5.3	Schematizzazione di una parcel in una cella	47
5.4	Esempio di configurazione per cui l'algoritmo di ricerca standard fallisce	47
6.1	Goccia UWS	54
6.2	Diagramma complessivo Wang	55
6.3	Esempio di valutazione del coefficiente angolare	56
6.4	Confronto dati simulati-dati sperimentali, 373 K	57
6.5	Confronto dati simulati-dati sperimentali, 423 K	57
6.6	Confronto dati simulati-dati sperimentali, 473 K	58
6.7	Confronto dati simulati-dati sperimentali, 523 K	58
6.8	Confronto dati simulati-dati sperimentali, 573 K	59
6.9	Iniettore Bosch a sei fori	61
6.10	Dominio di calcolo caso SAE	62
6.11	Rappresentazione spray caso SAE	63
6.12	Confronto dati simulati-sperimentali caso 1.1 kG/m^3 , acqua	64

6.13	Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.0 kG/m^3 , acqua . . .	64
6.14	Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.7 kG/m^3 , acqua . . .	65
6.15	Confronto dati simulati-sperimentali caso 1.1 kG/m^3 , UWS . . .	66
6.16	Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.0 kG/m^3 , UWS . . .	66
6.17	Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.7 kG/m^3 , UWS . . .	67
6.18	Confronto dati simulati-sperimentali caso 1.1 kG/m^3 , UWS . . .	67
6.19	Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.0 kG/m^3 , UWS . . .	68
6.20	Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.7 kG/m^3 , UWS . . .	68
6.21	Dominio di calcolo caso flusso in moto	70
6.22	Rappresentazione dello spray pubblicato nell'articolo del Prof. Birkhold	70
6.23	Immagine spray sperimentale a 10 ms	71
6.24	Immagine spray simulato	71
6.25	Temperatura dello spray a 10 ms	72
6.26	Temperatura dello spray a 10 ms, caso acqua	72
6.27	Percentuale(in moli) di H_2O all'interno dello spray a 10 ms . . .	73
6.28	Percentuale(in moli) di UREA all'interno dello spray a 10 ms . . .	73
6.29	Temperatura del gas a 10 ms	74
6.30	Temperatura del gas a 10 ms, caso acqua	74
6.31	Percentuale di H_2O all'interno del gas a 10 ms	75
6.32	Percentuale di H_2O all'interno del gas a 10 ms, caso acqua . . .	75
6.33	Percentuale di UREA all'interno del gas a 10 ms	76
7.1	Dichiarazione delle proprietà dell'UREA nel codice	79
7.2	Valori assegnati alle proprietà dell'UREA nel codice	80
7.3	UREA function	80
7.4	Densità dell'UWS implementata nel codice	81
7.5	Tensione di vapore dell'UWS implementata nel codice	81
7.6	Coefficiente di diffusione binario implementato nel codice	82
7.7	Condizione di boiling: miscele liquide	82
7.8	Condizione di boiling: soluzioni	82
7.9	tau evaporation	82
7.10	tau boiling	82
7.11	$c_{p,UWS}$	83
7.12	Costanti del modello di break up KHRT, caso iniezione ambi- ente quiescente	83

Sommario

Nel presente lavoro di tesi é stato sviluppato un nuovo modello per la simulazione dell'iniezione di AdBlue all'interno dei gas di scarico dei motori alternativi a combustione interna. Si é quindi rivolta particolare attenzione all'implementazione del modello di evaporazione. Inoltre é risultata necessaria anche l'implementazione di modelli capaci di descrivere sia le proprietá delle soluzioni acqua-UREA che quelle del soluto (UREA) dedicando in entrambi i casi particolare attenzione alla valutazione della tensione di vapore. Il modello é stato implementato come libreria da utilizzare nel pacchetto CFD OpenFOAM. Sono presentati i modelli teorici di riferimento, la schematizzazione del modello di evaporazione implementato e la descrizione delle proprietá delle soluzioni acqua-UREA cosí come presenti nel codice. Il modello implementato é validato nel caso di evaporazione di singola goccia e nel caso di iniezione di spray in ambiente quiescente. Inoltre il modello é testato nel caso di iniezione all'interno di ambiente con flusso in moto.

Parole Chiave: *Iniezione di AdBlue, Modello di Evaporazione, Proprietá delle soluzioni acqua-UREA, OpenFOAM*

In this Thesis is developed a new model to simulate the injection of AdBlue in gas flow for SCR applications. Particular attention is paid to the implementation of the model of evaporation. Furthermore It is necessary the implementation of models capable to describe the properties of UREA-water-solutions and the properties of the solute (UREA) dedicating in both cases particular attention to the study of vapor pressure. The Thesis presents theoretical models, the schematic model of evaporation implemented and the description of properties of UREA-water-solutions. The model implemented is validated in the case of evaporation of single drop and in the case of injection of spray in quiescent environment. Moreover the model is tested in the case of injection within environment where there is a flow in motion.

Key Words: *AdBlue Injection, Evaporation Model, UREA-water-solution properties, OpenFOAM*

Capitolo 1

Introduzione

La sempre crescente preoccupazione per gli effetti sull'ambiente, sulle persone e sul clima globale delle emissioni inquinanti ha portato negli ultimi anni alla promulgazione di numerose e sempre più stringenti normative atte a regolamentare e ridurre tali emissioni.

Tra i maggiori responsabili della produzione di queste sostanze inquinanti vi è il settore dei trasporti il quale utilizza come fonte energetica principale i combustibili fossili. La combustione degli idrocarburi comporta la formazione di varie tipologie di inquinanti, di cui i principali sono: idrocarburi incombusti (HC), ossidi di azoto (NO_x), particolato (PM), monossido di carbonio (CO) e anidride carbonica (CO_2); quest'ultima, pur non avendo effetti immediati e dannosi per la salute (è un prodotto di molti processi biologici degli esseri viventi), è comunque considerata un inquinante a causa della sua stretta correlazione con l'effetto serra e con il conseguente riscaldamento globale.

L'entità di queste emissioni nocive è strettamente legata al combustibile e al tipo di ciclo termodinamico adottato. Allo stato attuale le maggiori emissioni specifiche sono imputabili al motore Diesel, il quale trova impiego sia su molteplici categorie di veicoli (in particolare di grossa taglia) sia per applicazioni stazionarie.

1.1 Principali inquinanti dei motori Diesel

La combustione realizzata nel motore Diesel avviene con elevato eccesso d'aria e per la gran parte in fase diffusiva (a causa della bassa volatilità dei combustibili maggiormente utilizzati in questo tipo di motori); ciò comporta che le emissioni di HC e CO siano molto ridotte (praticamente nulle) mentre sono molto elevate le emissioni di NO_x e particolato.

La formazione degli NO_x è legata principalmente alla prima fase della combustione, durante la quale si ha che una piccola frazione del combustibile

evapora e si miscela con l'aria aspirata, dando luogo ad una combustione che avviene in fase premiscelata con una carica mediamente magra; questa condizione, unita all'elevato incremento di temperatura, risulta estremamente favorevole per la formazione degli NO_x .

La formazione del particolato é invece legata alle fasi successive della combustione. La maggior parte del combustibile, infatti, evapora soltanto dopo l'iniezione a causa del calore generato; ciò da luogo ad una combustione in fase diffusiva e gli elevati gradienti termici nell'intorno delle gocce, uniti ad un ambiente povero di ossigeno, provocano fenomeni di pirolisi del combustibile allo stato liquido causando la perdita degli atomi di idrogeno e formando i nuclei che daranno origine ai complessi molecolari di atomi di carbonio costituenti il particolato solido.

1.2 Tecniche di abbattimento degli inquinanti nei motori Diesel

La riduzione delle emissioni di particolato é affidata ad un filtro, detto filtro antiparticolato (DPF, Diesel Particulate Filter), il quale consiste in una struttura a nido d'ape i cui canali sono alternativamente aperti e chiusi alle estremitá e la cui porositá permette il passaggio dei soli gas. L'accumulo di depositi solidi causa l'aumento della contropressione allo scarico con una conseguente riduzione delle prestazioni del motore, rendendo quindi necessaria la rigenerazione del filtro; tale rigenerazione si realizza mediante combustione del particolato accumulato. Piú complesso risulta invece l'abbattimento degli NO_x ; infatti l'eliminazione di questo inquinante avviene mediante reazioni chimiche di riduzione; la difficultá in questo caso sta nel fatto che il motore Diesel opera con elevato eccesso d'aria e quindi obbliga ad effettuare le reazioni di riduzione in presenza di elevate concentrazioni di ossigeno (le quali favorirebbero invece le reazioni di ossidazione).

Le tecniche sviluppate ricadono in due categorie: la prima consiste nell'utilizzo di convertitori catalitici ad accumulo e riduzione di NO_x (NAC, NO_x Adsorber Catalyts), la seconda invece si basa sulla riduzione selettiva catalitica degli NO_x (SCR, Selective Catalytic Reduction) e impiega un agente riducente iniettato dall'esterno (generalmente ammoniaca).

1.2.1 Sistemi SNCR/SCR

Allo stato attuale la configurazione maggiormente utilizzata é quella dei sistemi che ottengono la riduzione chimica degli ossidi in azoto inerte tramite l'iniezione di un opportuno reagente. Tali sistemi, che consentono una significativa riduzione delle concentrazioni di NO_x in uscita all'impianto, pos-

sono essere realizzati secondo processi che lavorano in condizioni catalitiche (SCR) o non-catalitiche (SNCR). Tanto i processi catalitici quanto quelli non-catalitici operano secondo principi e dinamiche di reazione simili e si differenziano esclusivamente per la presenza (nei primi) di un elemento catalizzatore che accelera il processo.

Come detto, quindi, la riduzione selettiva degli ossidi di azoto avviene con modalità e dinamiche simili in entrambe le configurazioni del sistema di trattamento. Essa consiste in una reazione di ossidoriduzione in cui l'azoto presente in forma ossidata (con valenza +2 nel monossido e +4 nel biossido) è ridotto alla forma molecolare N_2 (a valenza 0) dall'azione riducente di un opportuno reagente chimico costituito da ammoniaca, urea o composti azotati simili il quale a sua volta si ossida e si trasforma in azoto molecolare inerte.

L'utilizzo diretto dell'ammoniaca risulta problematico per le applicazioni mobili sia sotto il profilo della sicurezza (essa è tossica ed infiammabile) sia sotto il profilo della logistica (essa è allo stato gassoso, con tutte le criticità che ciò comporta); per tali motivi generalmente (ed in particolare nelle applicazioni mobili) si utilizza una soluzione di acqua e urea dalla quale si ricava l'ammoniaca per mezzo di reazioni di termolisi. Oggetto di questa tesi sarà lo sviluppo e l'implementazione, all'interno del pacchetto CFD (Computational Fluid Dynamics) OpenFOAM, di un modello di evaporazione delle soluzioni acquose validato sia nel caso di singola goccia che nel caso di spray; in particolare nel caso di evaporazione di singola goccia la validazione sarà ottenuta in base ai dati sperimentali forniti dall'articolo del Prof. Wang[13] mentre nel caso di spray di UWS saranno utilizzati nel caso di ambiente quiescente dei dati sperimentali forniti da un articolo del Prof. M. Bhagat[15]; per il caso di iniezione in ambiente con flusso in moto ci si riferisce ad un articolo pubblicato dal Prof. Birkhold[18].

Capitolo 2

Equazioni dello stato gassoso

Il primo passo per lo sviluppo di un codice per simulazioni fluidodinamiche é la modellazione e la messa in equazioni matematiche dei fenomeni in esame. Il problema oggetto di questa tesi vede la presenza contemporanea di una fase gassosa, una fase liquida e di reciproche interazioni chimico-fisiche tra le due (evaporazione del liquido, reazioni chimiche, ecc.).

Inizialmente verranno presentate le leggi costitutive e le ipotesi utilizzate nella modellazione del comportamento delle varie specie coinvolte, quindi si passerá alla scrittura delle equazioni di conservazione delle grandezze di interesse per il nostro studio; particolare attenzione verrà poi dedicata al fenomeno della turbolenza, sia nei suoi caratteri generali sia evidenziando le peculiarità di alcune modellizzazioni di uso comune.

L'utilizzo congiunto delle leggi costitutive, dei modelli di trasporto e delle equazioni di conservazione in forma generale ci permetterà infine di scrivere il sistema di equazioni differenziali che governa i fenomeni in esame e le cui tecniche risolutive verranno presentate nei capitoli successivi.

2.1 Leggi costitutive

Le leggi costitutive permettono di descrivere matematicamente il comportamento del sistema o di parte di esso in relazione a determinati fenomeni; inoltre, dal momento che il sistema di equazioni di conservazione é indeterminato avendo un numero di incognite superiore al numero di equazioni, le leggi costitutive risultano fondamentali per la buona posizione del problema.

Per quanto riguarda il caso in esame, sarà necessario disporre di un modello matematico per il tensore degli sforzi $\underline{\underline{\sigma}}$, per il flusso di energia \vec{q} , per il flusso diffusivo molecolare \vec{y}_k e per il comportamento termodinamico delle specie coinvolte (equazione di stato).

2.1.1 Legge di Newton

La legge di Newton della viscosità permette di correlare il tensore degli sforzi $\underline{\underline{\sigma}}$ al tensore delle deformazioni $\underline{\underline{D}}$, il quale è funzione del gradiente di velocità.

$$\underline{\underline{\sigma}} = 2\mu\underline{\underline{D}} - \left(p + \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \vec{u} \right) \underline{\underline{I}} = \left(2\mu\underline{\underline{D}} - \frac{2}{3}\mu\nabla \cdot \vec{u}\underline{\underline{I}} \right) - p\underline{\underline{I}} = \underline{\underline{\tau}} - p\underline{\underline{I}} \quad (2.1)$$

$$\underline{\underline{D}} = \frac{1}{2}[\nabla\vec{u} + (\nabla(\vec{u})^T)] \quad (2.2)$$

Nelle due precedenti espressioni μ rappresenta la viscosità dinamica, p è la pressione statica, $\underline{\underline{I}}$ è il tensore identità e $\underline{\underline{\tau}}$ prende il nome di parte viscosa del tensore degli sforzi. Le precedenti formulazioni sono state ricavate sotto l'ipotesi di Stokes:

$$\lambda = -\frac{2}{3}\mu \quad (2.3)$$

2.1.2 Legge di Fourier

Il flusso totale di energia può essere visto come la somma di due contributi, un flusso termico, espresso mediante la legge di Fourier, e un flusso entalpico di tipo diffusivo (presente solo nel caso si considerino delle miscele).

La legge di Fourier esprime il flusso termico come funzione della temperatura T e della conducibilità termica λ_t :

$$\vec{q}_t = -\lambda_t\nabla T \quad (2.4)$$

mentre il flusso entalpico diffusivo può essere espresso in funzione della velocità di diffusione \vec{V}_k ricavata mediante la legge di Fick, la quale verrà esposta in seguito.

$$\vec{q}_d = \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k \omega_k \vec{V}_k \quad (2.5)$$

dove ρ è la densità, \hat{H}_k e ω_k sono rispettivamente l'entalpia specifica e la frazione massica della k -esima specie e N_C è il numero di specie chimiche presenti nel sistema.

Il flusso totale di energia risulta allora così definito:

$$\vec{q} = \vec{q}_t + \vec{q}_d = -\lambda_t\nabla T + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k \omega_k \vec{V}_k \quad (2.6)$$

2.1.3 Legge di Fick

Il calcolo delle velocità di diffusione e dei flussi diffusivi può essere effettuato direttamente risolvendo un sistema di equazioni lineari; tuttavia questo metodo risulta molto oneroso dal punto di vista computazionale in quanto tale sistema deve essere risolto per ogni specie, in ogni punto e direzione spaziali e in ogni istante temporale.

Per modellizzare il flusso diffusivo di massa così definito:

$$\vec{j}_k = \rho \omega_k \vec{V}_k \quad (2.7)$$

si preferisce quindi ricorrere alla legge di Fick, la quale stabilisce quanto segue:

$$\omega_k \vec{V}_k = -\Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k \quad (2.8)$$

$\Gamma_{k,mix}$ è il coefficiente di diffusione della k-esima specie nella miscela.

2.1.4 Equazioni di stato

L'equazione di stato permette di stabilire un legame tra una variabile di stato e le variabili del sistema; ad esempio nel caso in esame può essere ritenuta valida, per la fase gassosa, l'ipotesi di gas ideale la cui equazione di stato è la seguente:

$$\rho = \frac{p}{R \cdot T} \quad (2.9)$$

essendo

$$R^* = \frac{R}{MM} \quad (2.10)$$

con R costante universale dei gas pari a $8,314 \frac{kJ}{molK}$ e MM è la massa molare della specie considerata (oppure la massa molare media nel caso di una miscela).

2.2 Equazioni di Conservazione

Le equazioni che descrivono il comportamento della fase gassosa sono ricavate seguendo l'approccio euleriano, ossia tutte le variabili (\vec{u} , T, p, ecc) e le proprietà del fluido (λ_t , μ , ecc) sono funzioni delle coordinate spaziali e del

tempo. La scelta di questo approccio é giustificata dalla necessitá di determinare l'intero campo di moto, senza considerare il moto, e quindi la traiettoria, della singola particella di fluido (i quali sono facilmente determinabili utilizzando l'approccio lagrangiano).

Considerato un volume di controllo V , delimitato dalla superficie di contorno S con versore normale \hat{n} , considerato positivo uscente, le equazioni di conservazione sono riconducibili alla seguente formulazione generale:

$$\int_V \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dV + \int_S \rho\phi\vec{u} \cdot \hat{n} dS = \int_S \vec{Q}_s(\phi) \cdot \hat{n} dS + \int_V Q_v(\phi) dV \quad (2.11)$$

dove ϕ é la generica grandezza che si conserva. Il primo addendo al primo membro rappresenta il tasso di variazione di ϕ mentre il secondo addendo é il flusso convettivo di ϕ attraverso il contorno del sistema. I termini al secondo membro sono il flusso diffusivo e il termine di generazione (o distruzione) di ϕ rispettivamente attraverso la superficie di contorno e nel volume. Per la fase liquida si ritiene valida l'ipotesi di liquido incomprimibile.

La formulazione precedente é di tipo globale e non permette di conoscere ciò che avviene all'interno del volume di controllo; per poter determinare la distribuzione spaziale di ϕ in ogni punto del dominio é necessario ricondurre l'equazione ad una formulazione differenziale. Per fare ciò applichiamo il teorema della divergenza di Gauss agli integrali di superficie trasformandoli in integrali di volume e, dovendo essere la formulazione valida per qualsiasi volume di controllo, si ricava:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\phi\vec{u}) = \nabla \cdot \vec{Q}_s(\phi) + Q_v(\phi) \quad (2.12)$$

Sostituendo opportunamente ϕ , \vec{Q}_s , Q_v nell'espressione precedente é possibile ottenere le equazioni di trasporto necessarie per lo studio del sistema.

2.2.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione di conservazione della massa, o di continuitá, é ottenuta sostituendo $\phi = 1$, $Q_v = \dot{\Omega}$ nell'equazione di conservazione generica riportata nel paragrafo precedente e considerando \vec{Q}_s nullo, essendo nulli i flussi diffusivi.

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}) = \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} = \dot{\Omega} \quad (2.13)$$

Il termine di generazione $\dot{\Omega}$ é stato scomposto in due contributi, uno ($\dot{\Omega}^{Spray}$) é dovuto all'evaporazione delle gocce dello spray mentre l'altro ($\dot{\Omega}^{WallFilm}$) é dovuto all'evaporazione del film liquido a parete.

2.2.2 Equazione di conservazione delle specie chimiche

Nel sistema in esame, essendo esso multicomponente e reagente, oltre alla conservazione della massa, é necessario considerare anche la conservazione delle singole specie chimiche. Sostituendo nell'equazione di conservazione generica ricavata precedentemente $\Phi = \omega_k$ otteniamo l'equazione di trasporto per la specie k-esima:

$$\frac{\partial(\rho\omega_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u}\omega_k) = -\nabla \cdot \vec{j}_k + \dot{\Omega}^{Chemistry} + \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} \quad (2.14)$$

Il termine $-\nabla \cdot \vec{j}_k$ rappresenta il flusso diffusivo ed é modellato secondo la legge di Fick, mentre il termine $\dot{\Omega}^{Chemistry}$ rende conto della generazione o distruzione della k-esima specie per effetto delle reazioni chimiche (per la sua modellazione si ricorre alla legge di Arrhenius che esplicheremo successivamente). Gli effetti dell'evaporazione dello spray e del film liquido a parete sono considerati rispettivamente nei termini $\dot{\Omega}^{Spray}$ e $\dot{\Omega}^{WallFilm}$.

É necessario risolvere un'equazione di conservazione come quella appena esaminata per tutte le N_C specie presenti si ottiene un sistema di equazioni che deve rispettare le seguenti condizioni (necessarie per verificare la conservazione della massa):

$$\sum_{k=1}^{N_C} \vec{j}_k = 0 \quad (2.15)$$

$$\sum_{k=1}^{N_C} \dot{\Omega}_k^{Chemistry} = 0 \quad (2.16)$$

$$\sum_{k=1}^{N_C} \dot{\Omega}_k^{Spray} = \dot{\Omega}^{Spray} \quad (2.17)$$

$$\sum_{k=1}^{N_C} \dot{\Omega}_k^{WallFilm} = \dot{\Omega}^{WallFilm} \quad (2.18)$$

Sommando tra loro tutte le N_C equazioni di trasporto delle specie chimiche, rispettando le condizioni appena esaminate e ricordando che $\sum_{k=1}^{N_C} \omega_k = 1$, si ricava l'equazione di continuitá.

2.2.3 Equazione di conservazione della quantità di moto

L'equazione di conservazione della quantità di moto si ricava sostituendo $\phi = \vec{u}$ nella formulazione generale dell'equazione di continuitá e ponendo $\vec{Q}_s = \underline{\underline{\sigma}}$ e $Q_v = \rho\vec{f} + \zeta$.

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} + \rho \vec{f} + \zeta \quad (2.19)$$

É utile esplicitare il significato dei termini sorgente a destra dell'uguale: $\nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}$ rappresenta l'effetto sulla quantità di moto del tensore degli sforzi (gradienti di pressione, di velocità, ecc), \vec{f} tiene conto delle forze di campo o volumetriche (forza di gravità, di Coriolis, elettromagnetiche, ecc) e ζ esprime l'influenza dello spray liquido.

Considerando come sola forza di volume la gravità allora \vec{f} coincide con il vettore accelerazione di gravità \vec{g} , rendendo indispensabile conoscere l'orientazione della geometria.

2.2.4 Equazione di conservazione dell' energia

L'energia totale \hat{E} posseduta da una particella di fluido é la risultante di due componenti: l'energia cinetica specifica \hat{E}_k e l'energia \hat{U}_k associata al moto convettivo l'energia interna \hat{U} funzione invece del suo stato termodinamico (funzione quindi di pressione, temperatura e composizione chimica).

$$\hat{E} = \hat{E}_k + \hat{U}(p, T, \omega_k) = \frac{1}{2} \vec{u} \cdot \vec{u} + \hat{U}(p, T, \omega_k) \quad (2.20)$$

Sostituendo nella generica equazione di conservazione $\phi = \hat{E}$, $\vec{Q}_s = -\nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u})$ e $Q_v = \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k)$, otteniamo la seguente equazione dell' energia in forma differenziale:

$$\frac{\partial(\rho \hat{E})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{E}) = -\nabla \cdot \vec{q} + \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u}) + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) + \zeta \quad (2.21)$$

La potenza generata per unità di volume \dot{Q} é data da due contributi: $\dot{Q} = \dot{Q}^{Spray} + \dot{Q}^{WallFilm}$.

L'equazione (2.27) trasforma il primo principio dell'energia in forma differenziale. Esso afferma che la variazione di energia nel tempo é uguale alla somma dei flussi di energia dovuti al moto convettivo, del lavoro meccanico $\nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u}) + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k)$ e dell'apporto di calore $-\nabla \cdot \vec{q} + \dot{Q}$.

2.3 Equazioni di Navier-Stokes

L'unione delle equazioni di conservazione e delle leggi costitutive crea il sistema di equazioni differenziale descrittivo della miscela di fluidi Newtoniani oggetto del problema.

Equazione di conservazione della massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} = \dot{\Omega} \quad (2.22)$$

Equazione di conservazione delle specie chimiche

$$\frac{\partial(\rho\omega_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \omega_k) = -\nabla \cdot (\rho \Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k) + \dot{\Omega}^{Chemistry} + \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} \quad (2.23)$$

Equazione di conservazione della quantità di moto

$$\frac{\partial(\rho \vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = \rho \vec{f} - \left(\nabla p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \underline{\underline{u}} \right) + \nabla \cdot \left[\mu \left(\nabla \vec{u} + \nabla (\vec{u})^T \right) \right] + \zeta \quad (2.24)$$

Equazione di conservazione dell'energia

$$\frac{\partial(\rho \hat{E})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \cdot \hat{E}) = \nabla \cdot (\underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{u}) + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) + \nabla \cdot \left(\lambda_t \Delta T - \rho \sum_{k=1}^{N_C} \hat{H}_k \omega_k \vec{V}_k \right) + \zeta \quad (2.25)$$

Ricordando che l'entalpia specifica é definita come:

$$\hat{H} = \hat{U} + \frac{p}{\rho} \quad (2.26)$$

e introducendola nell'equazione di conservazione dell'energia otteniamo la seguente formulazione:

$$\frac{\partial(\rho \hat{H})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{H}) = \frac{DP}{Dt} - \nabla \cdot \vec{q} + \underline{\underline{\tau}} : \nabla \vec{u} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) \quad (2.27)$$

Il termine $\Psi = \underline{\underline{\tau}} : \nabla(\vec{u})$, chiamato funzione di dissipazione, rappresenta il doppio prodotto interno tra la parte viscosa del tensore degli sforzi e il gradiente della velocità; dal punto di vista fisico esprime la dissipazione di energia meccanica in energia termica dovuta agli effetti viscosi. Normalmente l'equazione di conservazione dell'energia é espressa in termini di entalpia sensibile specifica \hat{H}_s cosí definita:

$$\hat{H}_s = \hat{H} - \sum_{k=1}^{N_C} \Delta \hat{H}_{f,k}^0 \cdot \omega_k \quad (2.28)$$

dove $\Delta \hat{H}_{f,k}^0 \cdot \omega_k$ é l'entalpia di formazione standard della k-esima specie. É possibile quindi riscrivere la equazione di bilancio dell'energia in termini di entalpia sensibile specifica:

$$\frac{\partial (\rho \hat{H}_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \hat{H}_s) = \frac{DP}{Dt} - \nabla \cdot \vec{q} + \Psi + \dot{Q} + \dot{Q}^{Chemistry} + \rho \sum_{k=1}^{N_C} \omega_k \vec{f}_k \cdot (\vec{u} + \vec{V}_k) \quad (2.29)$$

Il termine $\dot{Q}^{Chemistry}$ é l'energia per unità di tempo liberata o richiesta dalle reazioni chimiche.

$$\dot{Q}^{Chemistry} = - \sum_{k=1}^{N_C} \Delta \hat{H}_{f,k}^0 \cdot \Omega_k \quad (2.30)$$

Si osservi che nella stesura del sistema di equazioni di Navier-Stokes non é stata formulata alcuna ipotesi sul regime di moto, quindi esso é valido sia per flussi in regime laminare che per flussi in regime turbolento. Inoltre si noti che la temperatura non appare esplicitamente come incognita (almeno nella formulazione piú generale): essa dovrá essere ricavata, secondo le leggi costitutive, a valle della risoluzione del sistema stesso.

2.4 Turbolenza

I fluidi possono presentare due regimi di flusso differenti: laminare e turbolento. Il regime laminare é caratterizzato da un moto ordinato in cui sono prevalenti gli effetti viscosi e i filetti infinitesimi di fluido scorrono l'uno sull'altro senza alcun tipo di rimescolamento (né macroscopico né microscopico); nel regime turbolento, invece, gli effetti viscosi non sono sufficienti a compensare gli effetti inerziali causando un flusso caotico e rimescolamenti su piccola e grande scala.

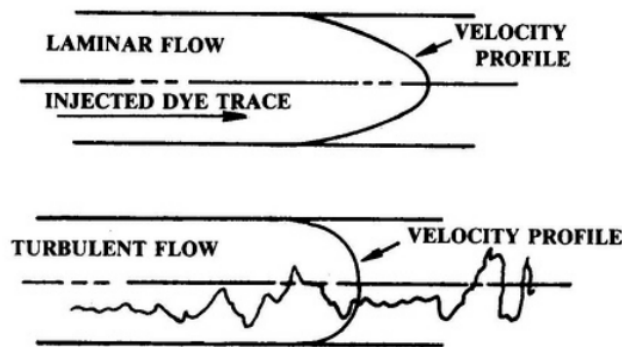


Figura 2.1: Flusso laminare/turbolento

Il principale parametro che consente di discriminare tra i differenti regimi di moto é il numero di Reynolds; esso é il risultato dell'adimensionalizzazione dell'equazione della quantità di moto.

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (2.31)$$

U e L sono rispettivamente la velocità e la dimensione lineare caratteristiche del problema; dal punto di vista fisico il numero di Reynolds é il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze d'inerzia e l'ordine di grandezza delle forze viscosse. Il numero di Reynolds critico che separa il regime laminare da quello turbolento é un valore convenzionale che varia in funzione del problema in quanto tra il moto assolutamente laminare e il moto turbolento completamente sviluppato esiste una transizione caratterizzata da un intervallo di numeri di Reynolds.

2.4.1 Caratteristiche della turbolenza

I flussi turbolenti presentano delle caratteristiche peculiari: essi infatti sono fortemente instazionari e intrinsecamente tridimensionali con fluttuazioni delle varie grandezze distribuite su un ampio intervallo di lunghezze e tempi caratteristici. Inoltre la turbolenza incrementa tutti i fenomeni diffusivi e di mescolamento (specie chimiche, quantità di moto, energia).

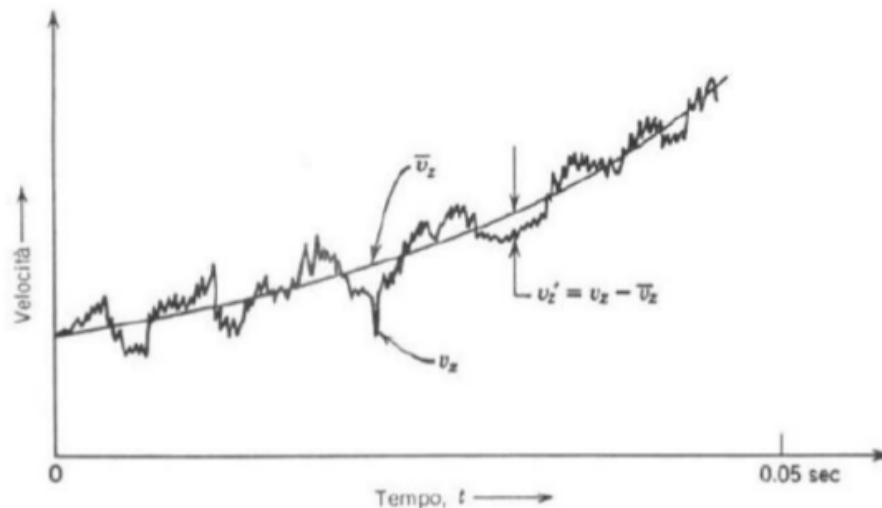


Figura 2.2: Oscillazioni di una componente del vettore velocità intorno al suo valore medio

All'interno dei moti turbolenti é possibile identificare delle strutture coerenti che interagiscono tra di loro trasferendo energia dalle strutture piú grandi a quelle piú piccole. Questo processo, che porta alla dissipazione dell'energia meccanica in calore per effetto della viscositá, é oggetto della Teoria di Kolmogorov. Essa individua due scale limite per le dimensioni dei vortici: la macroscale L , che rappresenta la dimensione dei vortici piú grandi ed é dello stesso ordine della grandezza caratteristica del sistema, e la scala di Kolmogorov l_d , che identifica la dimensione piú piccola che possono assumere i vortici e al di sotto della quale non é piú possibile trasferire energia, ma solo dissiparla.

La condizione che permette di determinare la microscala di Kolmogorov é $Re(l_d) = 1$; ció inoltre ci consente di identificare la scala al di sotto della quale gli effetti viscosi prevalgono sugli effetti inerziali. $u_{l,d}$ indica lâampiezza delle fluttuazioni di velocitá alla microscala di Kolmogorov.

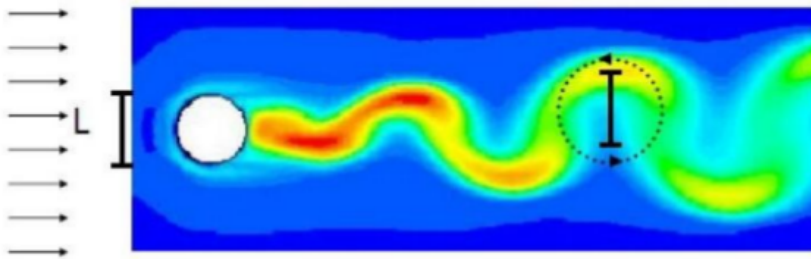


Figura 2.3: Scale Kolmogorov

Modellazione della Turbolenza

Le equazioni di Navier-Stokes, come precedentemente sottolineato, non necessitano di ipotesi sul tipo di flusso preso in esame; tuttavia, la simulazione diretta di un flusso turbolento richiederebbe una discretizzazione spaziotemporale tanto raffinata da risolvere il moto fino alla microscala di Kolmogorov e ai tempi caratteristici ad essa associati. Tale approccio risulta, però, estremamente oneroso dal punto di vista computazionale in quanto la microscala é tanto piú piccola quanto piú elevato é il numero di Reynolds del problema in esame, e quindi non é attualmente applicabile alla maggioranza dei problemi riscontrati nella pratica. Si rende pertanto necessaria una modellazione della turbolenza che consenta contemporaneamente di ottenere dei risultati accurati e di ridurre il costo computazionale delle simulazioni.

Nell'ambito della fluidodinamica computazionale il metodo piú utilizzato é la mediazione temporale: il valore istantaneo di ogni grandezza puó essere

scorporato nella somma di un opportuno termine medio e di un termine fluttuante.

La scelta dell'intervallo di tempo utilizzato nella mediazione é particolarmente critica in quanto esso deve essere sufficientemente grande da non risentire delle fluttuazioni istantanee, ma non eccessivamente grande da perdere traccia delle fluttuazioni stesse. La tecnica piú semplice é la mediazione secondo Reynolds, la quale però non viene utilizzata nei codici CFD in quanto in essa compaiono dei termini difficili da gestire; per ovviare a questo inconveniente si preferisce utilizzare la mediazione secondo Favre.

Mediazione secondo Reynolds

La generica grandezza ϕ , funzione della posizione spaziale e del tempo, può essere espressa come somma di una componente media $\bar{\phi}$ e un termine fluttuante ϕ' :

$$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i, t) + \phi'(x_i, t) \quad (2.32)$$

Il valore medio $\bar{\phi}$ é definito come media temporale sull'intervallo Δt sufficientemente maggiore della scala temporale dei vortici turbolenti:

$$\bar{\phi}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi(x_i, t) dt \quad (2.33)$$

mentre le fluttuazioni sono, per definizione, a media temporale nulla:

$$\bar{\phi}'(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi'(x_i, t) dt = 0 \quad (2.34)$$

Si osservi che la media del prodotto di due componenti fluttuanti non é nulla:

$$\overline{\phi'\psi'}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi'(x_i, t)\psi'(x_i, t) dt \neq 0 \quad (2.35)$$

Riportiamo a titolo esemplificativo l'equazione di conservazione della massa mediata secondo Reynolds:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\bar{u} + \overline{\rho'u'}) \quad (2.36)$$

Mediazione secondo Favre

Dato che la mediazione secondo Reynolds produce molti termini incogniti (che quindi necessitano di essere modellati) e dato che questi hanno una forma

del tipo $\overline{\rho'\phi'}$ (cioé costituiti dalla fluttuazione di densità e dalla fluttuazione della generica grandezza ϕ), si ricorre ad una mediazione pesata sulla massa per risolvere questo problema: tale media é detta media di Favre.

$$\phi(x_i, t) = \tilde{\phi}(x_i, t) + \phi''(x_i, t) \quad (2.37)$$

dove la grandezza mediata $\tilde{\phi}$ é definita come:

$$\tilde{\phi}(x_i, t) = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.38)$$

Inoltre le fluttuazioni di ϕ'' cosí ottenute godono delle seguenti proprietá:

$$\tilde{\phi}''(x_i, t) = \frac{\overline{\rho(\phi - \phi'')}}{\bar{\rho}} = 0 \quad (2.39)$$

$$\overline{\rho\phi''}(x_i, t) = 0 \quad (2.40)$$

$$\bar{\phi}''(x_i, t) = -\frac{\overline{\rho'\phi'}}{\bar{\rho}} \neq 0 \quad (2.41)$$

2.4.2 Equazioni della Turbolenza

Applicando la mediazione di Favre alle equazioni di Navier-Stokes otteniamo il seguente sistema di equazioni mediate nel tempo:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = \dot{\Omega}^{Spray} + \dot{\Omega}^{WallFilm} = \dot{\Omega} \quad (2.42)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\omega}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\omega}_k) = \nabla \cdot (\overline{\rho \Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k}) + \dot{\Omega}_k^{Chemistry} + \dot{\Omega}_k^{Spray} + \dot{\Omega}_k^{WallFilm} - \nabla \cdot (\overline{\rho \omega_k'' \tilde{\mathbf{u}}''}) \quad (2.43)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot \tilde{\underline{\underline{\tau}}} + \bar{\rho} \tilde{\mathbf{f}} - \nabla \bar{p} + \zeta + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}'' \tilde{\mathbf{u}}'') \quad (2.44)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{H}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{H}_s) = \frac{D\bar{p}}{Dt} - \nabla \cdot \bar{\mathbf{q}} + \bar{\Psi} + \bar{Q} + \bar{Q}^{Chemistry} - \nabla \cdot (\overline{\rho \tilde{\mathbf{u}}'' \hat{H}_s''}) \quad (2.45)$$

Si noti che nell'equazione dell'energia si é trascurato, per semplicitá, il termine dovuto alle forze esterne di volume.

Le equazioni mediate presentano dei termini aggiuntivi incogniti rispetto alla formulazione del capitolo precedente:

- il tensore degli sforzi turbolenti o sforzi di Reynolds $\nabla \cdot \overline{\rho \omega_k'' \vec{u}''}$
- il flusso turbolento delle specie $-\nabla \cdot \left(\overline{\rho \vec{u}'' u''} \right)$
- il flusso turbolento di entalpia $\nabla \cdot \left(\overline{\rho \vec{u}'' \hat{H}_s''} \right)$

La determinazione dei termini incogniti prende il nome di chiusura o modellazione della turbolenza e viene realizzata introducendo delle relazioni aggiuntive dipendenti dal modello di chiusura scelto. Il termine $\overline{\Omega_k^{Chemistry}}$, che rappresenta la velocità di formazione della k-esima specie, necessita anch'esso di una modellazione che descriva l'interazione tra la cinetica chimica e la turbolenza; data la non linearità di questo termine la sua modellazione risulta molto problematica e fondamentale per la buona riuscita delle simulazioni numeriche.

Sforzi di Reynolds

Applicando l'ipotesi di Bousinesq, secondo la quale anche i flussi turbolenti sono funzione del gradiente che li ha generati, possiamo esprimere il flusso della quantità di moto turbolento in funzione del gradiente di velocità, in analogia con il trasporto molecolare. Si introduce quindi la viscosità turbolenta μ_t e si esprimono gli sforzi di Reynolds con una formulazione che richiama la legge di Newton presentata nel capitolo precedente:

$$\overline{\rho \vec{u}'' \vec{u}''} = \mu_t \underline{\underline{\tilde{\tau}}} + \frac{2}{3} \overline{\rho k} \underline{\underline{I}} \quad (2.46)$$

dove k rappresenta l'energia cinetica turbolenza così definita:

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'' u''} \quad (2.47)$$

Il problema della chiusura si traduce allora nella stima della viscosità turbolenta; più avanti mostreremo le formulazioni più utilizzate analizzando nel dettaglio alcune di esse.

Flussi turbolenti di specie e di entalpia

Come ipotizzato per gli sforzi di Reynolds, anche i flussi turbolenti di specie ed entalpia sono considerati funzione di un gradiente e per essi vengono date le seguenti formulazioni:

$$\overline{\bar{\rho}\omega_k''\tilde{u}''} = -\frac{\mu_t}{Sc_{t,k}}\nabla\tilde{\omega}_k \quad (2.48)$$

$$\overline{\rho\tilde{u}''\hat{H}_s''} = -\frac{\mu_t}{Pr_t}\nabla\tilde{H}_s \quad (2.49)$$

ricordando che $k = 1 \dots, N_C$. I termini $Sc_{t,k}$ e Pr_t , inoltre, sono rispettivamente il numero di Schmidt turbolento della k-esima specie e il numero di Prandtl turbolento.

$$Sc_{t,k} = \frac{\mu_t}{\bar{\rho}\Gamma_{t,k,mix}} \quad (2.50)$$

$$Pr_t = \frac{\mu_t}{\bar{\rho}_t} \quad (2.51)$$

$\Gamma_{t,k,mix}$ é la diffusivit  materiale turbolenta della k-esima specie nella miscela e $\bar{\rho}_t$ é la diffusivit  termica turbolenta.

2.4.3 Modelli di chiusura

Come gi  accennato in precedenza il problema della chiusura della turbolenza consiste nell'ottenere un'espressione della viscosit  turbolenta. A tal proposito sono stati sviluppati vari approcci, comunemente classificati in base al numero di equazioni differenziali di trasporto aggiuntive utilizzate nel modello.

Lo schema pi  semplice é quello proposto da Prandtl il quale utilizza delle equazioni algebriche (quindi un modello a zero equazioni) basate sul tensore delle deformazioni medio $\underline{\tilde{D}}$ e la lunghezza di miscelazione l_{mix} .

$$\mu_t = \bar{\rho}C_\mu l_{mix}^2 |\underline{\tilde{D}}| \quad (2.52)$$

La lunghezza di miscelazione rappresenta una specie di libero cammino medio ed é fortemente dipendente dal problema: essa viene calcolata mediante formule empiriche e non pu  pertanto essere generalizzata.

Un esempio di modello ad una equazione é quello di Prandtl-Kolmogorov. Esso calcola la viscosit  turbolenta in funzione della lunghezza di miscelazione e dell'energia cinetica turbolenta, per la quale é necessario scrivere un'equazione di trasporto.

$$\mu_t = \bar{\rho}C_\mu l_{mix}\sqrt{k} \quad (2.53)$$

C_μ é una costante del modello posta pari a 0.09.

I modelli piú comunemente utilizzati sono tuttavia a due equazioni, i quali consentono di ottenere risultati accurati con costi computazionali non eccessivi.

In questi modelli vengono considerate sia l'energia cinetica turbolenta k sia la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ε e per questo motivo sono anche chiamati modelli $k - \varepsilon$. La formulazione della viscosità turbolenta per questi modelli é la seguente:

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.54)$$

L'equazione di trasporto per k é ottenuta partendo dalle equazioni di Navier-Stokes opportunamente modificate e mediate mentre l'equazione di trasporto per ε é derivata empiricamente.

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \bar{\rho} \varepsilon + \dot{W}^{Spray} \quad (2.55)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} \left(C_{1\varepsilon} P_k - C_{2\varepsilon} \bar{\rho} \varepsilon + C_s \dot{W}^{Spray} \right) \quad (2.56)$$

Il termine sorgente P_k é dato dalla seguente espressione:

$$P_k = -\bar{\rho} \widetilde{u^i u^i} \nabla \vec{u} \quad (2.57)$$

$C_\mu, \sigma_k, \sigma_\varepsilon, C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}$ sono costanti empiriche che dipendono dal modello scelto mentre C_s e \dot{W}^{Spray} tengono conto degli effetti dello spray sulla turbolenza.

Una variazione rispetto al modello $k - \varepsilon$ standard é il modello $k - \varepsilon$ *RNG* (*Re-Normalization Group*): esso deriva da una complessa base matematica teorica e si contraddistingue per avere dei diversi valori delle costanti, in particolare, il parametro $C_{1\varepsilon}$ non é piú una costante ma é espresso come:

$$C_{1\varepsilon} = C_{1\varepsilon}^0 - \frac{\eta \left(1 - \frac{\eta}{\eta_0} \right)}{1 + \beta \eta^3} \quad (2.58)$$

Il termine η é definito come:

$$\eta = \frac{k}{\varepsilon} \sqrt{\frac{P_k}{\mu}} \quad (2.59)$$

Per le due nuove costanti β e η_0 la teoria suggerisce rispettivamente i valori 0.015 e 4.4. La costante $C_{1\varepsilon}^0$ é assunta uguale alla costante $C_{1\varepsilon}$ del modello standard.

Riportiamo nella seguente tabella i valori delle costanti per il modello k - ε standard e il modello k - ε RNG:

Costanti dei modelli k- ε e k- ε RNG						
Modelli	C μ	σ_k	σ_ε	$C_{1\varepsilon}$	$C_{2\varepsilon}$	C_s
Standard	0.09	1.0	1.3	1.44	1.92	1.5
RNG	0.0845	0.7194	0.7194	(equ. precedente)	1.42	1.5

Il modello k - ε RNG presenta risultati piú in accordo con le misure sperimentali rispetto al modello standard e inoltre puó essere esteso alle regioni essenzialmente laminari di parete in quanto il termine di produzione di ε tiene conto dell'accresciuta dissipazione di queste zone attraverso il coefficiente C_1 (valutato appropriatamente tramite l'equazione già valutata in precedenza). Il modello k - ε RNG puó essere pertanto utilizzato per bassi numeri di Reynolds e non necessita delle funzioni di parete (che sono invece indispensabili per il modello standard). Oltre alla famiglia k - ε sono stati sviluppati molti altri modelli di turbolenza i quali considerano al posto di ε delle altre grandezze caratteristiche; citiamo ad esempio i modelli k - ω i quali si basano sulla grandezza ω definita come il rapporto tra ε e k, rappresentando quindi l'inverso del tempo medio di vita dei vortici turbolenti.

Funzioni di parete

Le equazioni di trasporto di k, ε e la relazione di Prandtl-Kolmogorov non sono applicabili alle regioni di parete, cioè nelle zone in cui il fluido, arrivando a contatto con una parete solida, deve assumere la velocità e la temperatura della stessa (condizione di aderenza). In queste regioni i fenomeni di trasporto sono dominati dalle proprietà molecolari essendo esse caratterizzate da strati in cui il moto é laminare. Occorre quindi utilizzare delle funzioni che raccordino la zona di parete con la zona di flusso indisturbato.

Nel substrato viscoso/conduittivo (laminare) lo scambio di quantità di moto, calore o altri scalari é governato dalle proprietà molecolari del fluido e i profili di velocità, temperatura ecc. sono funzioni lineari della distanza y dalla parete. Tra il substrato laminare e la zona pienamente turbolenta esiste un substrato di transizione nel quale i profili variano logaritmicamente con y. Considerando pareti lisce si posso definire i seguenti profili universali di velocità:

$$u^+ = y^+ \quad (y^+ \leq y_u^+) \tag{2.60}$$

$$u^+ = \frac{1}{k} \ln_e(Ey^+) \quad (y^+ > y_T^+) \quad (2.61)$$

ed i seguenti profili universali di temperatura:

$$T^+ = Pr y^+ \quad (y^+ \leq y_T^+) \quad (2.62)$$

$$T^+ = \frac{1}{k} \ln_e(Fy^+) \quad (y^+ > y_T^+) \quad (2.63)$$

La costante $k \sim 0.42$ é detta costante di von Karman e $y_u^+ \sim 11$ é lo spessore adimensionale del substrato viscoso. Per ricavare il valore della costante $E \sim 9.8$ é sufficiente raccordare i due profili su esposti in $y^+ = y_u^+$. I valori di F e y_t dipendono dal numero di Prandtl e sono oggetto di vari studi. Le grandezze adimensionali u^+ , y^+ , T^+ utilizzate nei profili universali sono ottenute utilizzando come termini di riferimento la velocità di attrito $u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$, la lunghezza ν/u_τ e la temperatura $q_w/(\rho c_p u_\tau)$.

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad (2.64)$$

$$y^+ = \frac{y u_\tau}{\nu} \quad (2.65)$$

$$T^+ = \frac{(T - T_w) \rho c_p u_\tau}{q_w} \quad (2.66)$$

τ_w é lo sforzo tangenziale a parete, μ é la viscosità cinematica (μ/ρ), T_w é la temperatura di parete e q_w é il flusso termico a parete.

Data l'enorme importanza delle funzioni di parete, soprattutto nello studio di problemi con scambio termico, sono state sviluppate molte formulazioni (che non vengono qui riportate) modificando opportunamente le relazioni e tenendo, ad esempio, conto della rugosità superficiale della parete.

Le funzioni di parete non sono necessarie nel caso in cui il modello di turbolenza scelto riesca a simulare anche le zone con bassi numeri di Reynolds, in modo da risolvere quindi le equazioni anche nello strato limite.

Capitolo 3

Equazioni dello spray

La fase liquida presente nel sistema viene trattata in modi diversi; infatti per lo spray si ricorre ad un approccio lagrangiano mentre per il film liquido a parete si utilizza un approccio euleriano.

La scelta dell'approccio lagrangiano per lo spray é legata ai costi computazionali necessari per il calcolo: utilizzando un approccio euleriano, infatti, sarebbe necessaria una discretizzazione spaziale piú piccola della dimensione dell'iniettore in modo da poter cogliere tutti i fenomeni legati all'iniezione di un liquido. Essendo la dimensione dell'iniettore molto piccola rispetto alle dimensioni caratteristiche del sistema si avrebbe un numero eccessivo di celle di calcolo; ciò renderebbe eccessivamente onerosa la risoluzione del sistema di equazioni differenziali.

L'evoluzione dello spray é descritta dagli stessi principi di conservazione già visti per la fase gassosa applicati alla singola goccia: conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. Per descrivere completamente le interazioni interne alla fase liquida e le interazioni con la fase gassosa circostante sono introdotti ulteriori modelli, basati su correlazioni sperimentali, che consentono di quantificare l'evaporazione, lo scambio termico, l'atomizzazione e il breakup.

3.1 Equazione della massa della goccia

L'unico termine di variazione di massa della goccia é dato dall'evaporazione (non essendo considerata in questo caso la condensazione). L'equazione ha quindi la seguente forma:

$$\frac{dm_d}{dt} = \dot{m}_d \quad (3.1)$$

dove \dot{m}_d rappresenta il tasso di evaporazione. Esso é calcolato mediante la seguente relazione:

$$\dot{m}_d = -\pi D\Gamma\rho_v Sh \ln_e \frac{(p - p_{v,\infty})}{(p - p_{v,s})} = -\pi D\Gamma\rho_v Sh \ln \left(1 + \frac{X_{v,s} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,s}} \right) \quad (3.2)$$

D é il diametro della goccia, ρ_v é la densità dei vapori vicino alla goccia, Γ é il coefficiente di diffusione massico e Sh é il numero di Sherwood. La densità dei vapori é calcolata secondo le legge dei gas perfetti mentre il numero di Sherwood é stimato con la correlazione di Ranz-Marshall:

$$Sh = 2.0006 + 0.514Re^{1/2}Sc^{1/3} \quad (3.3)$$

Re é il numero di Reynolds e Sc é il numero di Schmidt definito dal rapporto tra la viscosità cinematica ν e il coefficiente di diffusione massico Γ .

I termini che compongono l'argomento del logaritmo sono rispettivamente la pressione parziale p_v e la frazione molare X_v dei vapori; il pedice ∞ indica che la grandezza é valutata in un punto sufficientemente lontano dalla goccia mentre il pedice s indica che la grandezza é valutata in condizioni di saturazione.

Nella pratica l'equazione che descrive il tasso di evaporazione della goccia é risolta introducendo un tempo caratteristico dell'evaporazione τ_e cosí definito:

$$\tau_e = \frac{m_d}{\pi D\Gamma Sh\rho_v \ln(1 + B)} \quad (3.4)$$

dove B é il numero di Spalding:

$$B = \frac{X_{v,s} - X_{v,\infty}}{1 - X_{v,s}} \quad (3.5)$$

L'equazione di conservazione della massa risulta quindi:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_e} \quad (3.6)$$

In caso di ebollizione infatti la pressione di saturazione tende alla pressione ambiente e quindi $B \rightarrow \infty$, $\tau_e \rightarrow 0$ e il tasso di evaporazione tende a infinito, condizione non fisicamente accettabile. Il tasso di evaporazione, in queste condizioni, é allora governato dalla rapidità con cui viene fornito calore al liquido (in modo da farlo quindi dipendere dal numero di Nu):

L'equazione di conservazione della massa della goccia assume allora la seguente forma:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{\pi D \lambda_t Nu}{c_{p,v} \ln \left(\frac{c_{p,v}}{\hat{H}_v} (T - T_d) + 1 \right)} \quad (3.7)$$

Nu é il numero Nusselt definito piú avanti, $c_{p,v}$ é il calore specifico dei vapori, \hat{H}_v é il calore latente di vaporizzazione, $(T - T_d)$ é la differenza di temperatura tra l'ambiente circostante e la goccia.

Definendo un tempo caratteristico dell'ebollizione τ_b otteniamo :

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_b} \quad (3.8)$$

dove:

$$\tau_b = \frac{m_d c_{p,v}}{\pi D \lambda_t Nu \ln \left(\frac{c_{p,v}}{\hat{H}_v} (T - T_d) + 1 \right)} \quad (3.9)$$

La transizione da evaporazione ad ebollizione avviene quando $\tau_b > \tau_e$ e $p_{v,s} \rightarrow p$, passando dall'equazione del tasso di evaporazione della goccia relativa al tempo di evaporazione all'equazione del tasso di evaporazione della goccia relativa al tempo di ebollizione.

3.2 Equazione di moto della goccia

L'equazione della quantità di moto della goccia é data dalla seconda legge di Newton:

$$m_d \frac{d\vec{u}_d}{dt} = \vec{F} \quad (3.10)$$

dove \vec{u}_d é la velocità della goccia e \vec{F} é la risultante delle forze ad essa applicate; considerando la resistenza aerodinamica (forze di drag) e la forza di gravità otteniamo:

$$\vec{F} = -\frac{\pi D^2}{8} \rho c_d |\vec{u}_d - \vec{u}| (\vec{u}_d - \vec{u}) + m_d \vec{g} \quad (3.11)$$

C_d é il coefficiente di drag stimato attraverso opportune correlazione; ad esempio, ignorando gli effetti di deformazione, di evaporazione e di prossimità (quest'ultimi dovuti ad un'elevata frazione volumetrica di liquido) otteniamo:

$$c_d = \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{2/3} \right) \quad (Re < 1000) \quad (3.12)$$

$$c_d = 0.424 \quad (Re > 1000) \quad (3.13)$$

in cui Re_d rappresenta il numero di Reynolds della goccia valutato alla velocità relativa tra goccia e flusso esterno.

$$Re_d = \frac{\rho |\vec{u}_d - \vec{u}| D}{\mu} \quad (3.14)$$

O'Rourke e Bracco suggeriscono la seguente modifica all'equazione che descrive il coefficiente di Drag per tenere in considerazione gli effetti legati ad un'elevata frazione volumetrica di liquido (la quale può aumentare il coefficiente di drag effettivo, tipicamente nella zona vicina all'iniettore):

$$c_d = \frac{24}{Re} (\theta^{-2.65} + \frac{1}{6} Re_d^{2/3} \theta^{-1.78}) \quad (Re < 1000) \quad (3.15)$$

$$c_d = 0.424 \quad (Re > 1000) \quad (3.16)$$

θ é la frazione di vuoto locale la quale quantifica la frazione di volume occupata dai gas e sarà quindi tanto piú piccola quanto maggiore é la quantità di liquido presente nell'intorno della goccia. Inoltre bisogna considerare che, a causa delle forze aerodinamiche, la goccia non mantiene una forma sferica ma si deforma con una conseguente variazione del coefficiente di drag calcolabile secondo la seguente relazione:

$$c_d = c_{d,sfera} (1 + 2.632y) \quad (3.17)$$

dove c_d é il coefficiente di drag della perfetta forma sferica e y quantifica la deviazione dalla forma sferica (si veda la figura 3.1).

Nella pratica l'equazione della quantità di moto della goccia é risolta introducendo un tempo caratteristico della quantità di moto τ_u cosí definito:

$$\tau_u = \frac{8m_d}{\pi \rho c_d D^2 |\vec{u}_d - \vec{u}|} = \frac{4}{3} \frac{\rho_d D}{\rho c_d |\vec{u}_d - \vec{u}|} \quad (3.18)$$

In modo da poter ottenere la seguente equazione risolutiva:

$$\frac{d\vec{u}_d}{dt} = -\frac{\vec{u}_d - \vec{u}}{\tau_u} + \vec{g} \quad (3.19)$$

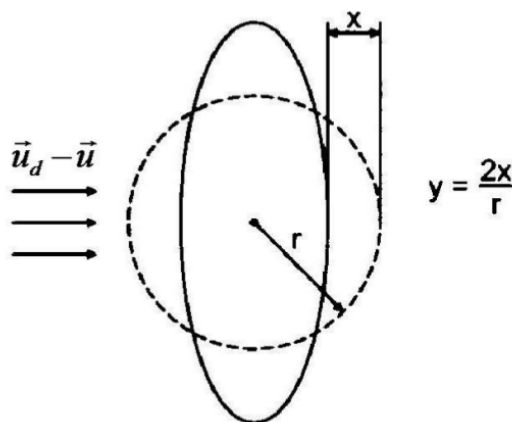


Figura 3.1: Deformazione delle gocce a causa delle Forze Aerodinamiche

3.3 Equazione dell'energia della goccia

La goccia riceve energia dai gas la quale viene utilizzata per incrementarne la temperatura e per fornire il calore latente di evaporazione. L'evaporazione é sempre presente fintanto che i gas attorno alla goccia non siano saturi, quindi il tasso di evaporazione é sempre negativo, ossia $\dot{m}_d < 0$.

Nel caso in cui il calore proveniente dai gas fosse insufficiente la quantità mancante verrebbe prelevata dall'energia della goccia, diminuendone la temperatura.

L'equazione per lo scambio termico risulta:

$$m_d \frac{d\hat{H}_d}{dt} = \dot{m}_d \hat{H}_v(T_d) + \pi D \lambda_t Nu (T - T_d) f \quad (3.20)$$

dove H_d rappresenta l'entalpia sensibile della goccia, Nu é il numero di Nusselt e f é un fattore correttivo che tiene conto del contemporaneo scambio di calore e di massa.

Il numero di Nusselt rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza dello scambio termico convettivo e l'ordine di grandezza dello scambio termico conduttivo nel fluido. Esso é calcolato con la seguente correlazione:

$$Nu = 2.006 + 0.514 Re^{1/2} Pr^{1/3} \quad (3.21)$$

Si noti che la correlazione del numero di Sh e del numero di Nu hanno la stessa forma; infatti, sostituendo al numero di Sherwood il numero Nusselt e al numero di Schmidt il numero di Prandtl, ricaviamo espressioni uguali. Ciò

é dovuto al fatto che esiste un'analogia tra lo scambio di massa e lo scambio di calore.

Il numero di Prandtl Pr é definito come il rapporto tra la viscosità cinematica ν e la diffusività termica α . Il fattore correttivo f é definito come:

$$f = \frac{z}{e^z - 1} \quad (3.22)$$

$$z = -\frac{c_{p,v}\dot{m}_d}{\pi D \lambda_t Nu} \quad (3.23)$$

Come per le precedenti equazioni si definisce un tempo caratteristico dello scambio termico τ_h :

$$\tau_h = \frac{m_d c_{l,d}}{\pi D \lambda_t Nu} \quad (3.24)$$

Possiamo quindi ricavare la formula dell'energia nella formula finale:

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{T - T_d}{\tau_h} f - \frac{1}{c_{l,d}} \frac{\hat{H}_v(T_d)}{\tau_e} \quad (3.25)$$

Si noti che la formulazione presentata considera contemporaneamente lo scambio di calore sensibile e latente e non é possibile disaccoppiare i due contributi, ossia se non si considera l'evaporazione delle gocce esse non scambieranno nemmeno calore con i gas.

3.4 Modelli di atomizzazione

Dal momento che lo scopo dell'approccio lagrangiano é quello di evitare di dover risolvere la regione dell'iniettore, risulta necessario specificare le condizioni iniziali delle gocce dello spray. Questo puó essere fatto sia ricorrendo ad un modello di atomizzazione sia imponendo le dimensioni iniziali delle gocce (calcolate mediante un'opportuna distribuzione statistica) e l'angolo di apertura dello spray. Entrambe le opzioni devono essere ottimizzate al fine di ottenere dei risultati accurati; va tuttavia osservato che, mentre l'imposizione delle condizioni iniziali risulta piú semplice, veloce e diretto, l'utilizzo di un modello di atomizzazione é piú corretto dal punto di vista fisico.

La maggior accuratezza dei modelli di atomizzazione é attualmente offuscata dalle incertezze legati ai modelli di breakup; alla luce di ciò in questo lavoro si é proceduto imponendo le condizioni iniziali per lo spray.

3.5 Modelli di Break-up

Quando le gocce di liquido vengono iniettate iniziano a deformarsi e a frammentarsi sotto l'azione delle forze aerodinamiche; questo fenomeno é detto breakup. Lo scopo dei modelli di breakup é di descrivere la riduzione della dimensione delle gocce e, se il modello lo prevede, la formazione di nuove gocce piú piccole a partire dalle gocce piú grandi.

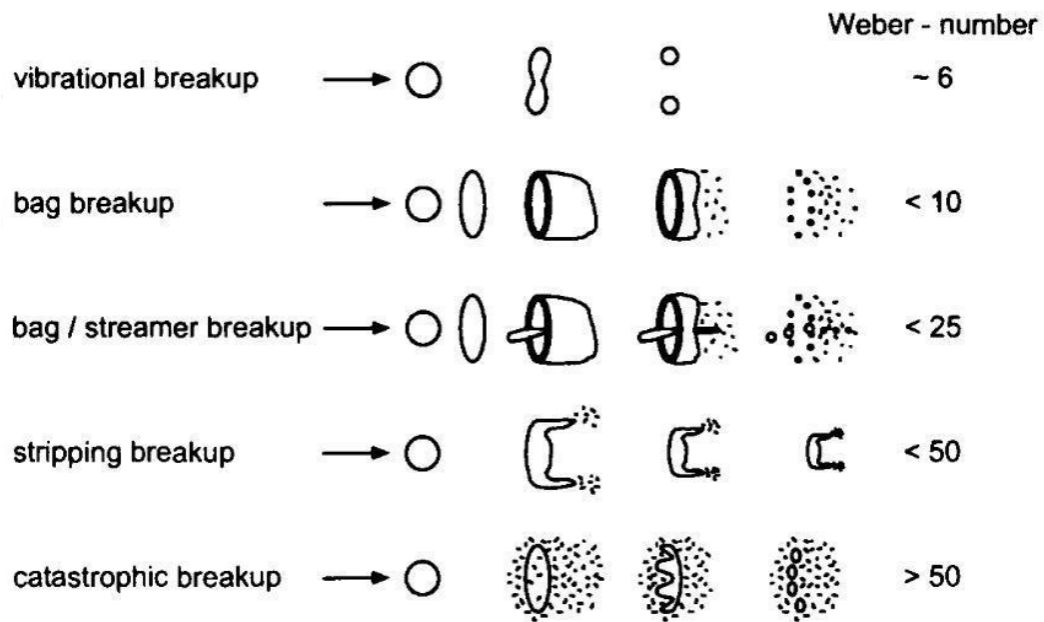


Figura 3.2: Esempi di regimi di Breakup

I modelli di breakup ricorrono a una serie di numeri adimensionali caratteristici delle interazioni presenti:

$$We = \frac{\rho |\vec{u}_{rel}|^2 r}{\sigma} \quad (3.26)$$

il quale rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze d'inerzia e l'ordine di grandezza delle forze dovute alla tensione superficiale;

$$Oh = \frac{\nu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma r}} = \frac{\sqrt{We_l}}{Re_l} \quad (3.27)$$

il quale rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze viscosive e l'ordine di grandezza delle forze elastiche che agiscono sulla superficie del fluido (in questo caso il liquido);

$$Ta = \frac{\Omega r^4}{\nu_l^2} = Oh\sqrt{We} \quad (3.28)$$

il quale rappresenta il rapporto tra l'ordine di grandezza delle forze centrifughe e l'ordine di grandezza delle forze viscosse.

σ é la tensione superficiale del liquido, \vec{u}_{rel} é la velocità relativa tra la goccia e i gas circostanti, r é il raggio della goccia, Ω é la pulsazione caratteristica e il pedice l indica che le proprietà termofisiche devono essere riferite al liquido. L'influenza del numero di Weber sulla fenomenologia del breakup é esemplificata nella figura precedente.

Il modello utilizzato in questo lavoro é il Reitz KHRT (Kelvin-Helmholtz Rayleigh- Taylor), il quale si basa su due schematizzazioni relative a due diversi regimi di breakup: il KH é tipico di un'instabilità superficiale mentre l'RT é caratteristico di una rottura catastrofica delle gocce. Il meccanismo dominante é quello che prevede il minor tempo di breakup.

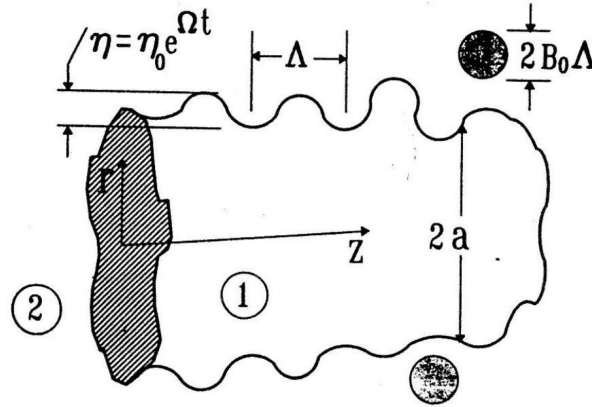


Figura 3.3: Rappresentazione schematica dell'instabilità del meccanismo di KH

Il meccanismo KH genera le nuove gocce con il seguente raggio:

$$r_c = B_0 \Lambda_{kh} \quad (3.29)$$

Le nuove gocce si separano dalle gocce di partenza, il cui raggio si riduce secondo la seguente legge:

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r - r_c}{\tau_{kh}} \quad (3.30)$$

$$\tau_{hk} = \frac{3.788 B_1 D}{\Omega_{kh} \Lambda_{kh}} \quad (3.31)$$

dove $B_0 = 0.61$ e $B_1 = 40$ sono costanti del modello e inoltre:

$$\Omega_{kh} = \frac{0.34 + 0.38We^{1.5}}{(1 + Oh)(1 + Ta^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_d r^3}} \quad (3.32)$$

$$\Lambda_{kh} = 9.02r \frac{(1 + 0.45\sqrt{Oh})(1 + 0.4Ta^{0.7})}{(1 + 0.865We^{1.67})^{0.6}} \quad (3.33)$$

Λ_{kh} é la lunghezza d'onda dell'onda, di pulsazione Ω_{kh} , che cresce piú rapidamente. Nel meccanismo RT la lunghezza d'onda Λ_{rt} é cosí calcolata:

$$\Lambda_{rt} = \frac{\pi}{K} \quad (3.34)$$

con

$$K = \sqrt{\frac{|g_t(\rho_l - \rho)|}{3\sigma}} \quad (3.35)$$

$$g_t = \left(\vec{g} + \frac{d\vec{u}_t}{dt} \right) \cdot \frac{\vec{u}_d}{|\vec{u}_d|} \quad (3.36)$$

Se Λ_{rt} diventa minore di r si assume che inizino a svilupparsi delle onde sulla superficie delle gocce; da questo istante in poi viene considerato il tempo di vita delle onde e quando esso supera il valore caratteristico $\tau_{rt} = 1/\Lambda_{rt}$, con:

$$\Omega_{rt} = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{27}\sigma} \frac{|g_t(\rho_l - \rho)|^{3/2}}{\rho_l + \rho}} \quad (3.37)$$

si verifica una rottura catastrofica delle gocce, la quale crea istantaneamente numerose gocce piú piccole. Infine il modello RT suddivide le gocce in modo tale che il nuovo numero statistico sia incrementato di un fattore r/Λ_{rt} e la nuova dimensione delle gocce viene corretta per assicurare la conservazione della massa.

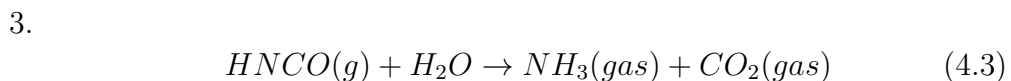
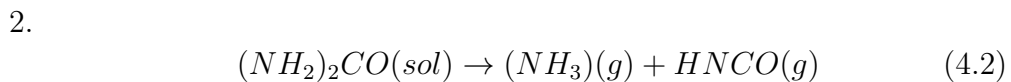
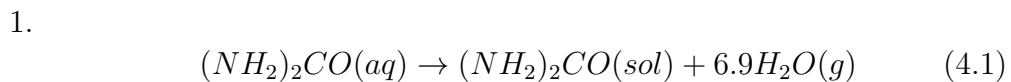
Tipicamente il meccanismo RT risulta dominante nella regione vicina all'iniettore dove le velocità e le accelerazioni sono piú elevate mentre il meccanismo KH prevale nelle regioni piú distanti.

Capitolo 4

Evaporazione dell'UWS: Modellazione

Come abbiamo già visto nei capitoli precedenti i sistemi SCR sono sistemi che ci consentono di ridurre le emissioni di NO_x in modo da abbatterne le emissioni.

Il meccanismo tramite il quale otteniamo tale riduzione é il seguente: l'UWS (conosciuto commercialmente come AdBlue) é iniettato nei gas di scarico del motore in modo da ottenere in tre passaggi successivi la generazione dell' NH_3 :



Per la conversione dell' NO_x sono cruciali l'evaporazione dell'agente riducente ed il modo in cui esso é distribuito nello spazio; inoltre determinate caratteristiche dello spray di UWS dovrebbero anche consentire di evitare la deposizione dell'UREA sulle pareti che potrebbero portare alla formazione di complessi di tipo melaminico.

Le modalità con le quali avviene l'evaporazione della soluzione acqua-UREA una volta che questa é stata iniettata all'interno dei gas di scarico del motore non sono del tutto chiare; nonostante ciò é ritenuto ormai certo che in prima istanza evapori tutta l'acqua presente nella soluzione per poi avere una successiva decomposizione dell'UREA.

Tale assunzione é data dal valore molto basso assunto dalla tensione di vapore dell'UREA.

Si sottolinea comunque che la presenza dell'UREA causa una variazione della tensione di vapore della soluzione rispetto al caso di sola acqua (una diminuzione) con conseguente diminuzione della velocità di evaporazione dell'acqua all'interno della soluzione.

4.1 Fase liquida

L'influenza dell'UREA sull'evaporazione dell'acqua dall'AdBlue é studiata teoricamente tramite l'utilizzo di vari modelli in modo da poter valutare sia l'influenza delle varie proprietà dell'UREA sia l'influenza delle condizioni dell'ambiente nel quale la soluzione é iniettata.

Tali modelli saranno spiegati nei seguenti paragrafi.

4.1.1 Rapid Mixing Model (RM Model)

All'interno del RM Model i coefficienti di trasporto per la fase liquida sono assunti infiniti. Ciò comporta che le proprietà del fluido, la concentrazione e la temperatura nel getto sono assunti uniformi ma non costanti, in modo che tali quantità siano in grado di variare nel tempo ma non nello spazio.

La variazione della concentrazione dell'UREA nel getto é valutata tramite la seguente equazione:

$$\frac{dY_u}{dt} = -\frac{\dot{m}_{vap}}{m_d} Y_u \quad (4.4)$$

La trasformazione di massa dalla fase liquida a gassosa é definita quindi negativa.

4.1.2 Diffusion Limit Model (DL model)

In tale modello non é considerata la componente di convezione interna in modo da valutare solo il trasporto diffusivo di energia e massa.

L'equazione di diffusione per le specie e per l'energia nel getto é risolta considerando le proprietà del fluido variabili:

$$\frac{\partial Y_u}{\partial t} = \frac{\Gamma_u}{r_d^2} \left[\frac{\partial^2 Y_u}{\partial w^2} + \left(\frac{2}{w} + \frac{1}{\rho_d} \frac{\partial \rho_d}{\partial w} + \frac{1}{\Gamma_u} + \frac{\partial \Gamma_u}{\partial w} + \frac{r_d}{\Gamma_u} \left(w \frac{dr_d}{dt} - u_r \right) \right) \frac{\partial Y_u}{\partial w} \right] \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial T_d}{\partial t} = \frac{a_d}{r_d^2} \left[\frac{\partial^2 T_d}{\partial w^2} + \left(\frac{2}{w} + \frac{1}{\lambda_d} \frac{d\lambda_d}{dw} + \frac{r_d}{a_d} \left(w \frac{dr_d}{dt} - u_r \right) \right) \frac{\partial T_d}{\partial w} \right] \quad (4.6)$$

Sapendo che:

$$a_d = \frac{\lambda_d}{\rho_d c_{p,d}} \quad (4.7)$$

u_r é la componente radiale della velocità convettiva che ci consente di considerare la variazione di densità all'interno del getto.

4.1.3 Effective Diffusion Model (ED Model)

L'ED model tiene in considerazione anche l'effetto (circolazione interna) dovuto alla convezione forzata. Esso é basato sul DL model ma considera in piú la circolazione interna in base ad una correzione empirica dei coefficienti di trasporto Γ_u e λ_d .

Il RM model ed il DL model sono caratterizzati da evidenti limiti in quanto descriventi solamente il trasporto diffusivo; può essere riassunto che il reale comportamento del getto durante l'evaporazione é all'interno del range delle soluzioni determinate con tali due modelli.

4.1.4 Modello scelto

In generale sappiamo che nel caso reale una volta che il getto di UWS é stato iniettato all'interno dei gas di scarico, i getti ivi formati sono riscaldati e, a causa del basso valore della tensione di vapore assunta dall'UREA rispetto alla tensione di vapore dell'acqua, da questi vapori solo l'acqua. L'evaporazione dell'acqua conduce ad un gradiente di concentrazione spaziale dell'UREA in modo che questo sia massimo in corrispondenza della superficie del getto. Come precedentemente spiegato la presenza dell'UREA nella soluzione comporta una diminuzione della tensione di vapore del getto; ovviamente tale diminuzione di tensione di vapore rispetto a quella del solo solvente corrisponde ad una diminuzione della velocità di evaporazione della soluzione.

La scelta del modello di evaporazione é quindi basata su uno studio[10] pubblicato dal Prof. Birkhold dell'Università di Karlsruhe il quale ha appunto messo a confronto i risultati ottenuti dai tre modelli su esposti in modo da verificare la maggiore adattebilitá ai fenomeni fisici appena descritti.

Birkhold verifica in primo luogo che la diminuzione della tensione di vapore del getto dovuta alla presenza di UREA confrontata rispetto al caso di getto di sola acqua é ottenuta con tutti i modelli di evaporazione utilizzati. Inoltre i modelli DL/ED calcolano una quantità di massa evaporata leggermente minore rispetto al RM model ma nel complesso i tre modelli si possono considerare per tale aspetto paragonabili.

Per quanto riguarda la temperatura superficiale del getto, invece, si verifica empiricamente che il getto di sola acqua aumenta la propria temperatura e, una volta raggiunto un dato valore, essa diviene costante; nel caso di getto di UWS si verifica invece durante tutta la fase di trasferimento di calore un aumento di temperatura della superficie.

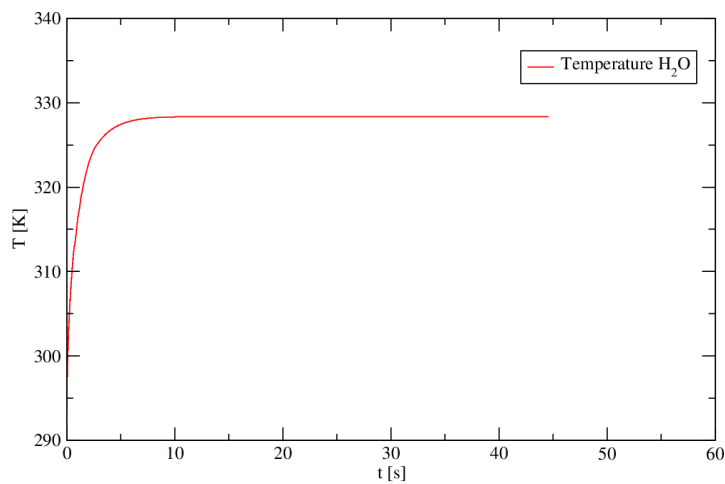


Figura 4.1: Temperatura goccia di H_2O

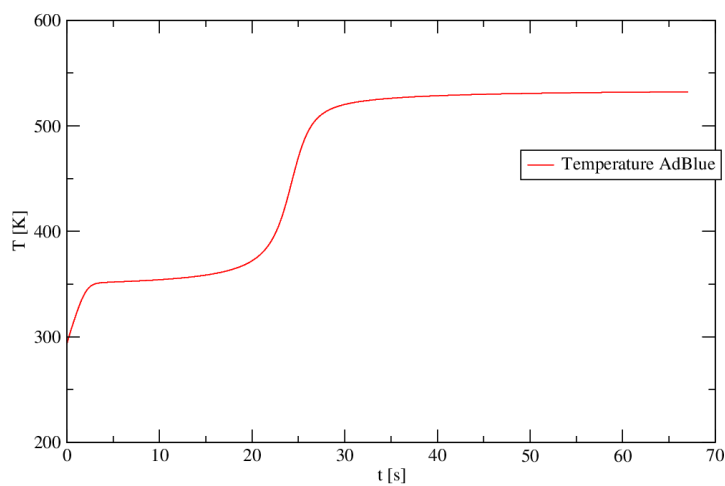


Figura 4.2: Temperatura goccia di UWS

Birkhold verifica che tale fenomeno é colto applicando sia il modello DL/ED model sia il modello RM model; inoltre si sottolinea come i primi due prevedano un'aumento di temperatura maggiore rispetto al RM model ma nel complesso i risultati ottenuti sono ritenuti paragonabili.

Se fino ad ora i risultati forniti dai modelli sono nel complesso simili, una reale distinzione si verifica nel comportamento del getto durante la fase di riscaldamento; infatti il RM model non é in grado di cogliere i gradienti di concentrazione di UREA che si presentano nella goccia durante la fase di trasferimento di calore mentre sia il DL model che il ED model hanno questa caratteristica.

Nonostante tale forte distinzione Birkhold verifica che la differenza di concentrazione di UREA fra il centro e la superficie del getto non é molto rilevante.

Per le caratteristiche di tali modelli, inoltre, si nota che nel caso di convezione naturale il RM model e il DL/ED model sono in grado di predire velocità di evaporazione sostanzialmente simili. Considerando ambienti ad elevata temperatura e caratterizzati da convezione forzata, invece, é nota la maggiore influenza della componente diffusiva nel getto (entrambi portano a velocità di evaporazione elevati). Birkhold, quindi, per un completo confronto fra modelli, ritiene utile testare tali condizioni di lavoro; il risultato in termini di massa evaporata del ED model é (come ci si aspettava) fra il risultato ottenuto dal RM model e il risultato ottenuto dal DL model; anche in questo caso però i risultati ottenuti dai tre modelli sono considerabili simili.

Una volta valutati i tre modelli in tutte queste configurazioni, si ritiene quindi che il RM model sia il modello piú utile da scegliere in quanto capace di calcolare in tutte i casi studiati una quantità di massa evaporata simile a quella fornita dal DL model e dal ED model ma con oneri computazionali sostanzialmente inferiori.

4.2 Fase gassosa

Le equazione descriventi il comportamento della fase gassosa sono state già ampiamente descritte nel capitolo precedente riguardante le equazioni dello spray (in particolare il paragrafo relativo all'equazione della massa).

4.3 Decomposizione termica dell'UREA

L'UREA liquefa a 406 K; oltre tale temperatura quindi inizia la decomposizione termica dell'UREA in NH_3 e acido isocianico.

La termolisi é evidente completamente, però, solo sopra i 425 K. Al fine di calcolare la completa decomposizione termica dell'UREA si estende il modello scelto per la descrizione dell'evaporazione (il RM model) a tale fenomeno.

Dalla letteratura é possibile ricavare due possibili approcci:

1. l'evaporazione dell'UREA dalla fase liquida/solida alla fase gassosa per poi decomporre in fase gassosa in NH_3 e HNCO
2. diretta decomposizione da UREA in fase liquida/solida ad NH_3 e HNCO in fase gassosa, senza quindi passare prima per la gassificazione dell'UREA

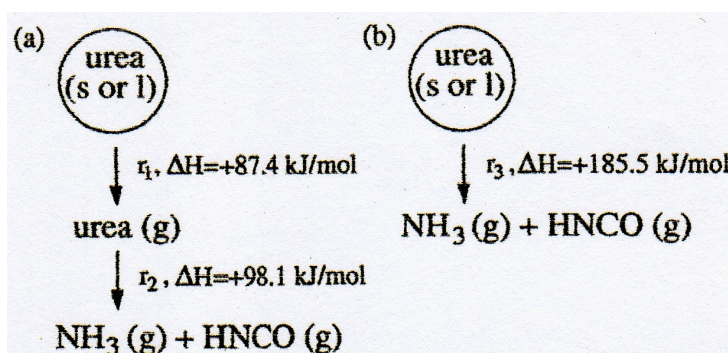


Figura 4.3: Possibili schematizzazione circa la decomposizione dell'UREA

Questi due modelli differiscono sostanzialmente nella modalità con la quale si apporta il calore alla reazione. Infatti l'inertza delle particelle solide/liquide di UREA ha un comportamento sostanzialmente simile rispetto al comportamento dell'UREA gassosa nei gas di scarico.

Nel primo caso l'entalpia di sublimazione (per il passaggio di UREA dallo stato liquido/solido a quello gassoso) è di 87.4 kJ/mol (alle condizioni standard di 298 K e 1 atm), essa comporta un raffreddamento delle particelle; una volta che siamo nelle condizioni di UREA in fase gassosa abbiamo la successiva decomposizione con una diminuzione di entalpia di 98.1 kJ/mol che comporta un raffreddamento del gas.

In realtà è noto che la decomposizione termica dell'UREA è limitata dalla cinetica chimica che caratterizza tali fenomeni; quindi l'UREA dovrà essere presente per un certo tempo durante la decomposizione in fase liquida/solida/gassosa. Dato che però l'UREA gassosa non pare essere stabile alle elevate temperature, non c'è alcuna certezza circa la presenza di UREA in fase gassosa.

E' quindi necessario supporre in tal caso che il passaggio da UREA in fase gassosa a NH_3 e HNCO sia caratterizzato da una velocità di reazione più alto della sublimazione dell'UREA liquida/solida; il valore totale di variazione di entalpia dovuto all'evaporazione dell'UREA solida/liquida e alla formazione di ammoniaca e acido isocianico è in totale di +185.5 kJ/mol.

Nel secondo approccio valutato si considera che l'UREA sublimi direttamente in NH_3 e acido isocianico in modo che l'entalpia di reazione totale dovuta alla termolisi é pari a $+185.5$ kJ/mol.

Data l'elevata instabilit  dell'UREA in fase gassosa il modello scelto é il secondo, in quanto apparentemente capace di predire in maniera comunque corretta le modalit  con le quali l'UREA si decompone.

4.4 Modello di cristallizzazione

Il fenomeno della cristallizzazione delle gocce é un fenomeno non trascurabile nello studio del comportamento dell'UWS all'interno dei gas di scarico. Si consideri una goccia di UWS sospesa in un ambiente ad una data temperatura costante. All'inizio l'UREA é completamente in soluzione ma in seguito alla dissoluzione (cio  alla disgregazione dell'UREA all'interno del solvente) si verifica il fenomeno della cristallizzazione dell'UREA. Ci  comporta la nascita di una cresta in superficie di forma irregolare in modo da lasciare liquida la regione interna alla goccia.

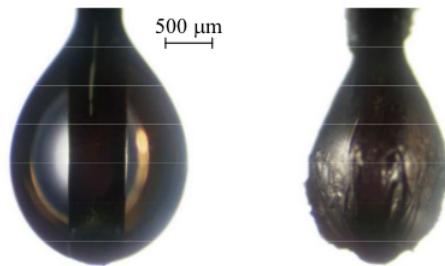


Figura 4.4: Goccia di UWS prima (sin) e dopo (dex) la dissoluzione

Tale fenomeno é strettamente legato all'evaporazione della soluzione.

Diversi autori hanno studiato la cristallizzazione della particella durante la fase di iniezione dello spray all'interno dei gas di scarico. La cristallizzazione della superficie della goccia é modellata tramite la formazione di una cresta solida attorno alla particella in modo da formare uno strato poroso permeabile all'acqua. E' noto inoltre che la maggiore resistenza al trasferimento di massa é strettamente influenzato da tale cresta esterna mentre la maggiore resistenza al trasferimento di calore é legato allo strato di gas intorno alla goccia. Pu  essere inoltre assunta una temperatura omogenea della goccia all'interno di tale strato poroso.

Da ricordare inoltre che, come gi  spiegato nei capitoli precedenti, durante l'evaporazione della goccia di UWS si verifica un arricchimento della

percentuale di UREA in seguito all'evaporazione dell'acqua in modo da comportare in seguito la saturazione della particella. Per considerare l'influenza di tale stato poroso sull'evaporazione della massa dalla singola goccia sarà necessario considerare la seguente equazione:

$$\dot{m} = \pi d \rho_{gas,ref} D_{s,ref} \log_e(1 + B_M) Sh \phi \quad (4.8)$$

ricordando che $D_{s,ref}$ é il coefficiente di diffusione binaria e B_M e Sh sono il numero di Spalding e quello di Sherwood (giá valutati nei capitoli precedenti).

La diminuzione della tensione di vapore dell'acqua in superficie é determinata in base alla legge di Raoult per le miscele binarie (valutata nel capitolo successivo).

Nell'equazione precedente la diminuzione di massa evaporata é legata al termine:

$$\phi = 1 - Y_{sol} \quad (4.9)$$

in modo da dipendere unicamente dalla frazione massica del soluto all'interno della soluzione.

In seguito la precipitazione del soluto all'interno della soluzione é considerata tramite il bilancio di massa; in realtà si é verificato che, per stabilità numeriche del modello studiato, il termine capace di rappresentare l'influenza della cresta sull'evaporazione della soluzione é riformulato come segue:

$$\phi = 1 - Y_{sol}^2(3 - 2Y_{sol}) \quad (4.10)$$

In generale tale coefficiente di riduzione dipende dalla cresta solida presente e dalle sue proprietà (come la permeabilità); per quanto riguarda le proprietà cinetiche della soluzione, notiamo che, anche per sostanze di cui sono note tutte le caratteristiche fisiche, tali proprietà non sono facilmente determinabili.

Capitolo 5

Implementazione

Le equazioni differenziali viste nei capitoli precedenti non sono risolvibili in forma chiusa se non per una gamma di problemi estremamente semplici e in definitiva di scarsa utilità pratica. Sarà quindi necessario ricorrere a procedure di risoluzione numeriche al fine di ottenere delle soluzioni per i problemi più complessi comunemente incontrati.

In questo lavoro saranno presentati alcuni fra gli approcci risolutivi più diffusi: il metodo ai volumi finiti (per la fase gassosa) e il metodo della rappresentazione lagrangiana (per lo spray). Questi approcci non risolvono il problema analitico (continuo e di tipo differenziale) ma ricorrono ad una discretizzazione spaziale e temporale, risolvendo quindi un problema approssimato (discreto e di tipo algebrico).

Il risultato finale sarà quindi dipendente, oltre che dalle ipotesi teoriche, anche dal tipo e dalla qualità della discretizzazione e dai metodi numerici di risoluzione impiegati.

Tre concetti matematici sono molto utili per stabilire il successo di un algoritmo numerico: convergenza, consistenza e stabilità.

1. Un metodo numerico si dice convergente se al tendere ad infinito del numero N di celle computazionali la differenza tra la soluzione approssimata ϕ_N e la soluzione esatta ϕ tende a zero: $\|\phi_N - \phi\| \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$.
2. Un metodo numerico si dice consistente se al tendere ad infinito del numero N di celle computazionali la soluzione esatta è soluzione anche del problema approssimato P_N : $P_N(\phi, BC) \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$, dove BC indica le condizioni al contorno.
3. Un metodo numerico si dice stabile se piccole variazioni delle condizioni al contorno comportano piccole variazioni della soluzione numerica: $\|\phi_{N,1} - \phi_{N,2}\| \leq C\|BC_1 - BC_2\|, C > 0$

5.1 Metodo ai volumi finiti

Il metodo ai volumi finiti consiste sostanzialmente nell'integrare le equazioni di Navier-Stokes su un dominio (la cella computazionale) il cui volume ha una dimensione finita e non infinitesima.

Le celle computazionali si ottengono suddividendo la geometria del problema in un numero finito di elementi dando origine ad una griglia di calcolo chiamata mesh. Successivamente tutti i termini delle equazioni vengono discretizzati e sostituiti con espressioni approssimate; in questo modo si passa da un problema di tipo differenziale ad un problema di tipo algebrico risolvibile mediante metodi iterativi. I valori delle grandezze discretizzate sono riportati nei centri delle celle computazionali, anche chiamati centroidi. Un esempio di cella computazionale con evidenziati gli elementi caratteristici é mostrato nella figura successiva.

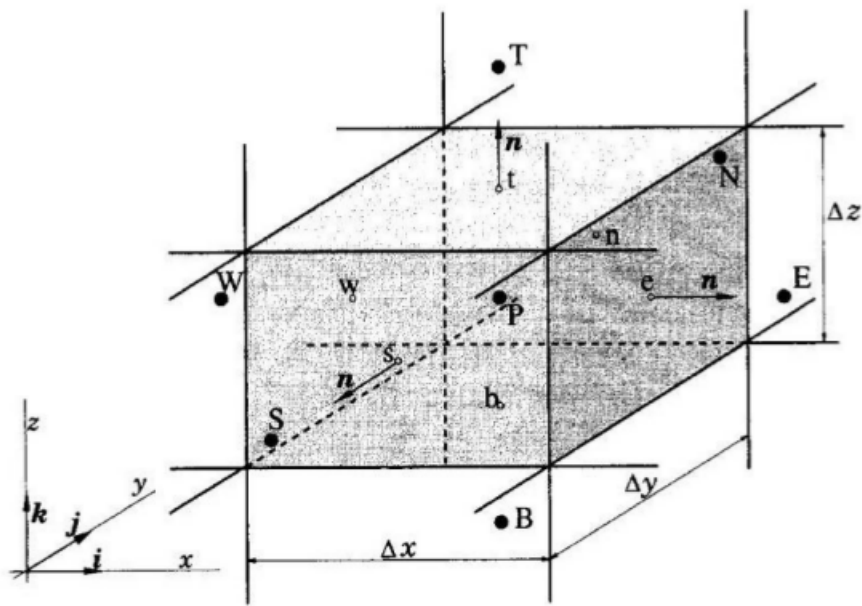


Figura 5.1: Cella di calcolo metodo ai volumi finiti

Ne consegue una rappresentazione che evidenzia la conservazione di importanti proprietà all'interno della cella di calcolo; vi é quindi un chiaro collegamento tra i principi di conservazione definiti nei capitoli precedenti e l'algoritmo risolutivo ottenuto. Questa caratteristica rende molto interessante l'applicazione di questo metodo alle equazioni della fluidodinamica in forma euleriana.

Partendo dall'equazione di conservazione della generica grandezza ϕ (presente nel secondo capitolo) é possibile scrivere un'equazione di bilancio all'interno del volume di controllo costituito dalla cella computazionale:

$$\begin{aligned} [\text{Variazione di } \phi \text{ nell'unit di tempo}] &= [\text{Tasso netto di formazione di } \phi] \\ &+ [\text{Flusso netto entrante di } \phi \text{ dovuto alla diffusione}] + \\ &+ [\text{Flusso netto entrante di } \phi \text{ dovuto alla convezione}] \end{aligned} \quad (5.1)$$

Esistono delle tecniche appositamente create per la discretizzazione dei fenomeni tipici della fluidodinamica come la convezione (cioé trasporto dovuto al campo di moto macroscopico del fluido), la conduzione (cioé trasporto dovuto alla diversa distribuzione di ϕ punto per punto) e i termini sorgente (associati alla formazione e distruzione di ϕ). Per ottenere una formulazione algebrica é quindi necessario discretizzare gli integrali di superficie (legati ai flussi attraverso il contorno della cella) e gli integrali di volume.

L'integrale di superficie totale é dato dalla sommatoria degli integrali sulle singole facce di contorno:

$$\int_S f dS = \sum_k \int_{S_k} f dS \quad (5.2)$$

Per calcolare l'integrale sulle singole facce sarebbe necessario conoscere la funzione integranda f , informazione ovviamente non disponibile in quanto sono noti solo i valori delle grandezze nei centroidi. La ricostruzione dell'integrale passa quindi attraverso due approssimazioni: prima di tutto si utilizza un numero finito di punti per valutare l'integrale sulla faccia e in secondo luogo i valori scelti sono ottenuti per interpolazione a partire dai valori nei centroidi. L'approssimazione piú semplice, detta regola del punto di mezzo, consiste nel calcolare l'integrale di superficie come il prodotto tra il valore nel centro della faccia (opportunamente interpolato) e l'area della faccia considerata. Altre approssimazioni utilizzano la regola del trapezio e la regola di Simpson le quali considerano un diverso numero di punti e diverse formulazioni per il calcolo dell'integrale.

L'integrale di volume é ottenuto come prodotto tra un opportuno valore medio della funzione integranda e il volume di controllo. La criticit del metodo risiede quindi nella determinazione del valore medio. L'approssimazione piú semplice é considerare come valore medio il valore nel centro cella essendo esso gi noto e non essendo quindi necessaria alcuna interpolazione. Approssimazioni piú accurate sono ottenute considerando piú punti nello spazio discretizzato; le principali tecniche sono:

- *Interpolazione Upwind*: é di tipo lineare backward o forward a seconda del verso del vettore della velocità. Il valore della funzione nel centro della faccia di interfaccia tra due celle é pari al valore di uno dei due centroidi scelto a monte rispetto al verso del vettore velocità. Questa tecnica é l'unica che soddisfa il criterio di boundedness in modo incondizionato cioè garantisce sempre l'impossibilità che si presentino oscillazioni numeriche. Tuttavia é un'approssimazione poco accurata in quanto introduce un'eccessiva diffusività numerica nelle soluzioni.
- *Interpolazione lineare centrata*: prende in considerazione i due centri cella già individuati dal metodo upwind ma interpola linearmente per ottenere il valore sulla faccia. É uno schema accurato al secondo ordine e l'errore é proporzionale al quadrato del passo della griglia. Si tratta dello schema del secondo ordine piú semplicemente implementabile e quindi piú usato anche se può comportare oscillazioni numeriche nelle soluzioni, come tutti i metodi di ordine superiore al primo.
- *Interpolazione quadratica Upwind (QUICK)*: l'approssimazione successiva consistente nel considerare una parabola anziché una retta come funzione interpolante. É necessario quindi utilizzare un maggior numero di punti per determinare la parabola interpolante complicando ulteriormente la procedura di calcolo. Questo metodo risulta generalmente del terzo ordine ma se affiancato a integrali di superficie calcolati con la regola del punto di mezzo l'approssimazione globale risulta del secondo ordine. L'accuratezza del metodo QUICK risulta praticamente comparabile con l'interpolazione lineare centrata.
- *Schemi di ordine superiore*: il loro utilizzo é sensato solo se anche gli integrali di superficie sono approssimati con metodi di ordine elevato, ad esempio utilizzando la regola di Simpson é necessario interpolare con polinomi almeno del terzo ordine.

5.2 Metodo della rappresentazione lagrangiana

Un primo e fondamentale concetto che deve essere introdotto parlando di simulazione numerica dello spray é la parcel. Essa rappresenta una classe di gocce aventi tutte le stesse caratteristiche (diametro, velocità, temperatura ecc...) e viene utilizzata per discretizzare la massa di liquido iniettata. Applicando le equazioni di conservazione e i modelli visti nel capitolo 3 alle parcel é possibile dare una descrizione di tipo statistico dell'evoluzione dello spray.

L'utilizzo delle parcel é giustificato dall'ipotesi che gocce vicine tra loro presentano caratteristiche e percorsi evolutivi simili e pertanto é possibile utilizzare un numero ridotto di elementi (le parcel) per descrivere il comportamento di un numero molto piú elevato di gocce. A seguito poi dei vari fenomeni che coinvolgono lo spray il numero e le caratteristiche delle parcel possono variare nel tempo come nelle realtà variano il numero e le caratteristiche delle gocce.

Il punto focale del trattamento numerico dello spray é la determinazione, per ogni intervallo di integrazione, della posizione di ogni singola parcel; questa funzione é svolta dagli algoritmi di tracking che saranno oggetto della prossima sezione.

5.2.1 Tracking

Esistono due possibili approcci per effettuare la ricerca delle parcel: l'algoritmo Lose-Find (LF) e l'algoritmo Face-To-Face (F2F).

L'algoritmo LF muove la parcel lungo la propria traiettoria, $\vec{u}_d \Delta t$, senza considerare la mesh, e quindi cerca la cella d'arrivo. Questo approccio é molto semplice da implementare ed é adatto se si utilizzano metodi numerici espliciti, i quali devono impiegare dei passi di integrazione molto piccoli e quindi gli spostamenti delle parcel sono contenuti. L'algoritmo di ricerca inizia dalla cella di partenza e investiga le celle limitrofe finché la parcel non viene individuata o finché la ricerca non ha coperto tutto il dominio.

L'utilizzo di passi d'integrazione molto piccoli risulta allora vantaggioso in quanto la parcel potrà compiere solo piccoli spostamenti e non sarà necessaria una ricerca in tutto il dominio, operazione questa estremamente onerosa dal punto di vista dei tempi computazionali e che dovrebbe essere evitata.

Se si utilizzasse un metodo numerico implicito, a causa dei passi d'integrazione utilizzabili, notevolmente maggiori, l'algoritmo LF risulterebbe inadeguato in quanto non c'è garanzia che la parcel passi attraverso tutte le celle lungo la propria traiettoria. Questo, oltre allo svantaggio già descritto sopra, comporta che i termini sorgente dovuti allo spray presentino dei picchi di eccessiva intensità tra un time-step e l'altro. Occorre quindi limitare il passo di integrazione annullando di fatto il vantaggio di usare un metodo implicito.

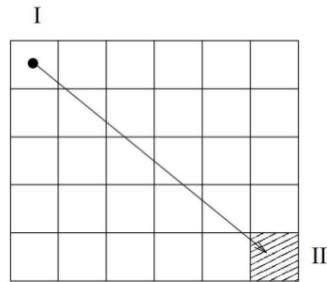


Figura 5.2: Instabilità dell'algoritmo LF dovuto ad un time step eccessivo

L'algoritmo F2F richiede di effettuare una sola ricerca quando la parcel viene introdotta per la prima volta nel sistema. Da questo istante in poi il percorso della parcel é seguito cella per cella attraverso il seguente parametro:

$$\lambda_i = \frac{(\vec{c}_i - \vec{x}_i) \cdot \hat{n}_i}{(\vec{u}_d \Delta t)} \cdot \hat{n}_i \quad (5.3)$$

dove \vec{c}_i e \hat{n}_i sono rispettivamente la posizione del centro e il versore normale alla i -esima faccia della cella in cui si trova la parcel. Se per qualunque faccia i si ha $\lambda_i > 1$ allora la parcel non lascia la cella e quindi i termini di sorgente legati allo spray possono essere calcolati direttamente; la posizione della parcel viene aggiornata. Se esiste almeno una faccia per cui $\lambda_i < 1$ allora la parcel colpisce la faccia i in corrispondenza della quale si ha il minimo valore positivo di λ_i . La parcel é mossa per un tempo pari a $\lambda \Delta t$ dove $\lambda = \min(\lambda_i) > 0$ e la sua nuova posizione é $\vec{x}_{new} = \vec{x}_{old} + \lambda \vec{u}_d \Delta t$. I termini sorgente sono calcolati per la cella di destinazione e la procedura precedente viene ripetuta fino a che la parcel non si é mossa per tutto il passo d'integrazione. Questo metodo garantisce che la parcel passi attraverso tutte le celle senza errori nel calcolo dei termini sorgente legati al passaggio da una cella all'altra e senza restrizioni sul passo d'integrazione.

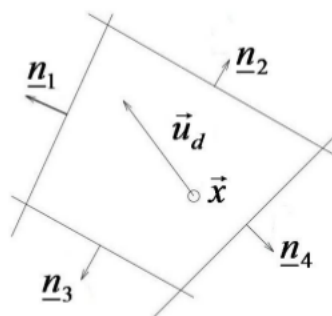


Figura 5.3: Schematizzazione di una parcel in una cella

La determinazione della cella in cui si trova una parcel viene effettuata utilizzando la seguente relazione:

$$\beta_i \leq 0, \quad \beta_i = (\vec{x} - \vec{c}_i) \cdot \underline{n}_i \quad (5.4)$$

Questa relazione funziona bene per celle tetraedriche, mentre presenta dei problemi nel caso di celle concave, in quanto la relazione può risultare non verificata anche se la parcel si trova all'interno della cella (come nella figura seguente):

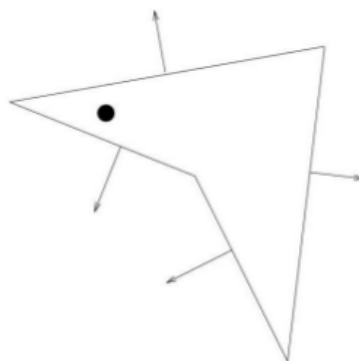


Figura 5.4: Esempio di configurazione per cui l'algoritmo di ricerca standard fallisce

5.3 Il software OpenFOAM

Il modello numerico riguardante le proprietà delle soluzioni acqua-UREA (in particolare relativo alla loro evaporazione) è stato implementato nel pacchetto open source OpenFOAM (Field Operation And Manipulation). Questo

é una libreria di calcolo sviluppata in C++ e basata sulla meccanica dei continui e particolarmente adatto alla risoluzione di problemi di fluidodinamica computazionale. Essendo fortemente orientato sulla programmazione ad oggetti é estremamente agevole implementare nuove funzionalità e nuove librerie, come ad esempio il modello di evaporazione e le proprietà delle soluzioni che sono l'oggetto di questo lavoro.

La simulazione vera e propria é affidata a dei pacchetti eseguibili chiamati solutori i quali si basano su alcune ipotesi sulla fisica del problema (flusso comprimibile o incomprimibile, subsonico o supersonico, monofase o multifase, presenza o assenza di reazioni chimiche ecc...) e su librerie sviluppate ad hoc per varie classi di problemi.

Il solutore sviluppato per l'applicazione ai sistemi ad iniezione di urea é stato chiamato `scrPimpleNoFilmPorousFoam` ed effettua i calcoli per flussi comprimibili, reagenti, con spray lagrangiano senza però considerare lo studio del film liquido a parete (che non é stato oggetto di questa tesi) in modo quindi da dover considerare nulli tutti i termini relativi al film liquido a parete presenti nelle equazioni teoriche riportate precedentemente.

Nelle prossime sezioni saranno esposte sia le proprietà dell'UREA sia le proprietà caratterizzanti l'UWS e la loro corrispondente rappresentazione nella sintassi del codice OpenFOAM.

5.3.1 Proprietá dell'UREA

La determinazione delle proprietà dell'UREA é stata ottenuta a seguito di una non breve ricerca bibliografica che ci ha portato a contattare anche una serie di docenti che hanno in passato pubblicato studi in merito a tale argomento: l'Ing. C. Habchi dell'IFP Energies nouvelles, il prof. B. Andersson dell'universitá Chalmers e il prof. M. F. Trujillo dell'universitá di Wisconsin; a tutti questi e in particolare all'Ing. C. Habchi vanno i nostri piú sentiti ringraziamenti per la disponibilità mostrata e la precisione dei dati forniti.

In base a tali fonti si é deciso di determinare diverse delle proprietà dell'UREA in base a studi pubblicati nel 1927 dal duo E.F.Permen e T.Lovett della Faraday Society; tali ricerche sono cosí remote nel tempo in quanto già in quel periodo l'UREA era utilizzato per altre applicazioni.

Riportiamo di seguito tutte le proprietà dell'UREA implementate nel codice; da notare che per il peso molecolare ovviamente si é fatto riferimento alla formula chimica dell'UREA, cioè il CH_4N_2O , mentre per il resto ci si é riferiti ai dati forniti dai due studiosi.

Proprietá UREA	
Peso Molecolare	60.056 kG/kMol
Temperatura critica	705 K
Pressione critica	$9.05010^6 Pa$
Volume critico	$0.218 \cdot 10^{-3} m^3/mol$
Fattore critico di comprimibilitá	0.337
Temperatura del punto triplo	405.85 K
Pressione del punto triplo	93.131 Pa
Temperatura di ebollizione	465 K

Per quanto riguarda invece l'entalpia di dissoluzione ci si é affidati all'assunzione fatta da quasi tutti gli articoli valutati; si é infatti considerato nel complesso trascurabile il suo contributo all'interno dell'evaporazione dei getti di UWS per sistemi SCR.

Inoltre sia il valore della densitá dell'UREA che il valore del calore specifico sono considerati costanti e pari a $1230 \text{ kG/m}^3 e 2006 \text{ kJ/(kGK)}$.

Determinazione della tensione di vapore dell'UREA

In ultima analisi si fa riferimento al calcolo della tensione di vapore dell'UREA. Tale proprietá é stata quella oggetto di maggiore studio in quanto essa non solo contribuisce a determinare il valore della tensione di vapore complessiva della soluzione (valore determinante per una corretta valutazione della quantitá di massa evaporata) ma é il anche il parametro che maggiormente influenza il fenomeno della decomposizione dell'UREA.

Sono state prese in considerazione diversi articoli riguardanti la valutazione della tensione di vapore (da quelli del prof. B. Andersson della Chalmers University a quelli forniti dal professore Birkhold, giá citato precedentemente); tutti tali articoli erano concordanti in una definizione di tipo esponenziale del legame fra la tensione di vapore dell'UREA e la sua temperatura:

$$p_{v,UREA} = e^{\left(A - \frac{B}{T + 3.3953 \cdot 10^{-3}} \right)} \quad (5.5)$$

Ogni articolo e quindi ogni docente propone, però, una determinata coppia di valori (A;B); nel capitolo seguente si esporrá nel dettaglio la scelta effettuata.

In appendice si riportano tutte le proprietá dell'UREA cosí come sono implementate nel codice.

5.3.2 Proprietá dell'UWS

Il codice OpenFOAM cosí come si presentava all'inizio del lavoro di tesi non era caratterizzato da una schemetizzazione delle proprietá relative alle soluzioni acquose; inizialmente l'unico modo per poter quindi valutare l'evaporazione di una soluzione acqua-UREA é stato quello di utilizzare la parte di codice relativo alle proprietá delle miscele liquide ideali. Tale scelta ha portato a risultati non sempre soddisfacenti in modo da causare la necessitá di implementare una libreria capace di schematizzare correttamente le proprietá dell'UWS; tale libreria é stata denominata `waterSolutionProperties`.

In primo luogo da un articolo del prof. S. Kontin dell'Universitá di Karlsruhe é stata ricavata un' espressione analitica relativa alla densitá in modo da poter correggere l'espressione relativa alle miscele liquide ideali che invece valuta la densitá come media pesata sulle frazioni molari delle densitá dei singoli componenti:

$$\rho_{UWS} = 1144.5 + 280Y_u - 0.5T \quad (5.6)$$

La tensione di vapore della soluzione aqua-UREA é stata invece determinata in base ad una media pesata sulle frazione molari delle singole tensioni di vapore caratterizzanti acqua ed UREA.

$$p_v = x_{H_2O}p_{v,H_2O} + x_{UREA}p_{v,UREA} \quad (5.7)$$

La determinazione di questa espressione é stata uno dei problemi centrali della tesi. Il codice riporta per le miscele di liquidi una media pesata sulle masse delle tensioni di vapore dei singoli componenti; questa formulazione é stata peró ritenuta scorretta in quanto (ricordando le proprietá delle soluzioni) é noto che per la Legge di Raoult la tensione di vapore di una miscela sia una media pesata sulle frazioni molari.

Inoltre altro elemento di discussione é stata l'assunzione (giá valutata nei capitoli precedenti) che dalla soluzione acqua-UREA evapori prima tutta l'acqua presente; per tale motivo si é ritenuto logico anche valutare la possibilitá di considerare che la tensione di vapore della soluzione coincidesse con quella della sola acqua fin quando questa non fosse evaporata completamente ed in seguito coincidesse con quella della sola UREA. I risultati ottenuti ed una attenta ricerca bibliografica hanno contribuito a risolvere questo dubbio: la tensione di vapore va valutata come media pesata sulle moli dei singoli componenti.

Altro elemento importante da valutare per la corretta valutazione dell'evaporazione della soluzione acqua-UREA é il coefficiente di diffusione binario; l'espressione valutata é la seguente:

$$D_{s,ref} = \frac{1.013 \cdot 10^{-3.5} \cdot T_{ref}^{1.75} \left(\frac{M_i + M_{air}}{M_i M_{air}} \right)^{0.5}}{p_{\infty} (w_i^{0.333} + w_{air}^{0.333})^2} \quad (5.8)$$

con M definita come la massa molare e w come il volume di diffusione atomico.

Per ciò che riguarda il volume di diffusione atomico, esso é un valore ancora non noto per quanto riguarda l'UREA e quindi si é ritenuto di assegnare all'UREA lo stesso valore dell'nEptano: 147.18 m^3 .

Anche per ciò che riguarda la condizione di ebollizione si é dovuta apportare una modifica al modello relativo alle miscele liquide. In tal caso infatti l'assunzione fatta dal codice era quella di considerare che quando la tensione di vapore di un singolo componente superava il valore della pressione esterna tutta la miscela iniziava a bollire (condizione di boiling). Tale ipotesi (la cui attendibilitá anche al caso di miscele liquide non é certa) é sicuramente non applicabile al caso di soluzioni; in tal caso infatti si ritiene piú appropriato stabilire che la condizione di boiling si verifichi quando la tensione di vapore di tutta la soluzione supera la pressione esterna.

Inoltre é stato possibile valutare tutte le altre proprietá non intensive (come ad esempio il calore specifico della soluzione) come media pesata sulle masse del soluto e del solvente:

$$c_{p,UWS} = c_{p,H_2O} Y_{H_2O} + c_{p,UREA} Y_{UREA} \quad (5.9)$$

In appendice si riportano tutte le proprietá dell'UWS cosí come sono implementate nel codice.

Capitolo 6

Validazione del modello

La validazione del modello di evaporazione implementato nel codice di calcolo é stata ottenuta in diversi step.

In primo luogo si é validato il modello nel caso di singola goccia; sono stati infatti riprodotte le stesse condizioni di lavoro presentate nell'articolo del Prof. Wang[13] il quale compie una attenta campagna sperimentale con l'obiettivo di studiare l'evaporazione di una singola goccia di AdBlue. Tale goccia é sospesa in un ambiente con pressione costante e le prove sono state effettuate considerando differenti temperature dell'ambiente.

Una volta ottenuto un set delle costanti di taratura capaci di cogliere in maniera appropriata i fenomeni riscontrati da Wang nel proprio lavoro sperimentale, si é passati alla validazione del modello di evaporazione applicato al caso di iniezione di spray.

E' stata effettuata in primo luogo la validazione del modello di evaporazione nel caso di iniezione di spray in ambiente quiescente; in tal caso non erano a disposizione dati relativi all'iniezione di acqua-UREA ma solo dati relativi all'iniezione di sola acqua (articolo[15] pubblicato dal prof. M. Bhagat). Per tal motivo é stato prima di tutto validato il modello di evaporazione applicato al caso di sola acqua (monocomponente) e poi é stato valutato l'effetto della presenza del soluto ripetendo le stesse prove precedenti ma considerando ovviamente una goccia di AdBlue.

Infine, non essendo disponibili dati sperimentali relativi ad iniezione in ambiente con flusso in moto, ci si é riferiti ad un articolo[18] proposto dal Prof. Birkhold.

6.1 Validazione del modello di evaporazione di singola goccia di AdBlue

Riportiamo di seguito la validazione del caso di evaporazione di singola goccia di AdBlue; in primo luogo saranno descritti i dati sperimentali forniti dal

prof. T.J. Wang ed in seguito si passerá al confronto fra dati sperimentali e quelli simulati per valutare l'effettiva capacità del modello di riprodurre in maniera corretta l'evaporazione della singola goccia di UWS.

6.1.1 Dati sperimentali

Il prof. T.J. Wang ha condotto una campagna sperimentale con l'obiettivo di valutare l'evaporazione di una singola goccia di AdBlue sospesa in un ambiente a pressione costante e considerando differenti condizioni di temperatura.

La goccia era tenuta sospesa nell'ambiente tramite un filo di quarzo la cui conducibilità termica é stata considerata trascurabile.

Di seguito si riporta una foto della goccia di UWS cosí come riportata nell'articolo:

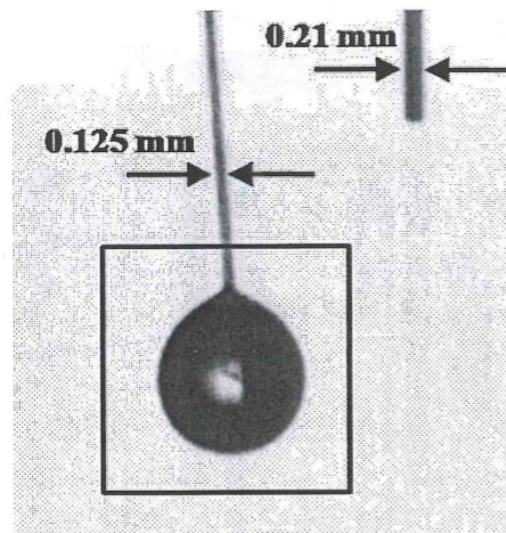


Figura 6.1: Goccia UWS

Si é monitorato, in particolare, il quadrato del diametro della goccia adimensionalizzato rispetto al quadrato del diametro iniziale (d^2/D_i^2) al variare del tempo anch'esso adimensionalizzato rispetto al quadrato del diametro iniziale t/D_i^2 .

Il range di temperatura nel quale sono state effettuate le prove va da 373 K a 573 K. All'aumentare della temperatura si sono verificati comportamenti della goccia dalla complessa descrizione come formazione di bolle, distorsione. Comunque al diminuire della temperatura tali fenomeni divengono sempre piú deboli fino scomparire.

Nonostante le difficoltà in una precisa valutazione del fenomeno dell'evaporazione della goccia è stata chiara la possibilità di assumere la presenza di due fasi: la prima nella quale abbiamo l'evaporazione di sola acqua e la seconda nella quale, una volta che l'acqua è completamente evaporata, si verifica la decomposizione dell'UREA.

Per ogni temperatura dell'ambiente è stato possibile ricavare il coefficiente angolare delle rette che rappresentano tali tendenze nel diagramma $d^2/D_i^2 = f(t/D_i^2)$.

Di seguito si riporta sia il grafico comprendente i risultati di tutte le prove effettuate sia un esempio di grafico nel quale sono valutati i coefficienti angolari delle rette:

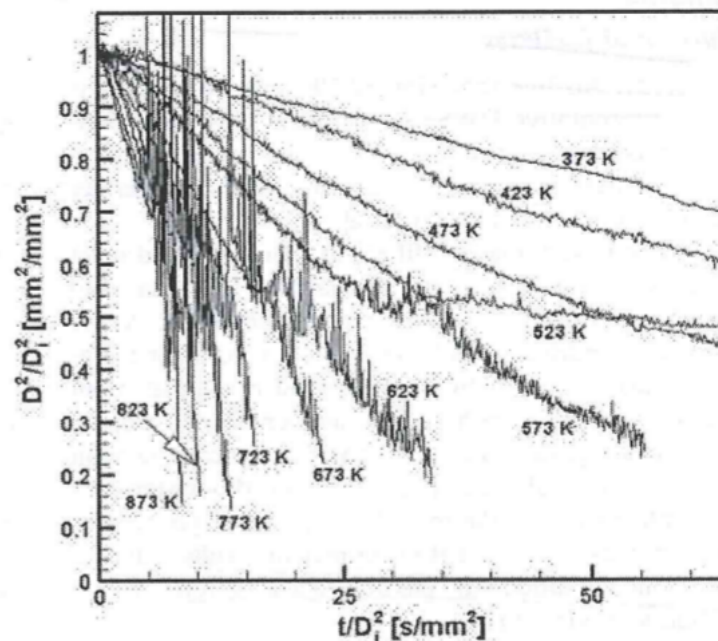


Figura 6.2: Diagramma complessivo Wang

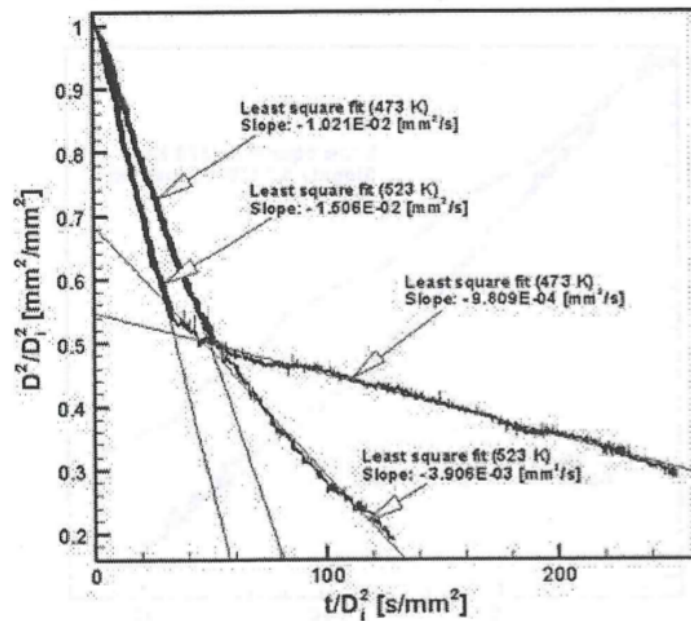


Figura 6.3: Esempio di valutazione del coefficiente angolare

6.1.2 Validazione modello nel caso di evaporazione di singola goccia di AdBlue

Al fine di validare il modello di evaporazione é risultato necessario determinare il valore piú opportuno delle costanti relative alla valutazione della tensione di vapore dell'UREA; per completezza si riporta qui la generica espressione di tipo esponenziale che si é implementata nel codice:

$$p_{v,UREA} = e^{\left(A - \frac{B}{3.395310^{-3} + T}\right)} \quad (6.1)$$

La coppia di valori (A;B) é stata oggetto di studi di diversi docenti; ognuno ha proposto una propria soluzione.

Il prof. A. Strom della Chalmers University ha proposto (11.663;4085.4), il prof. Birkhold (giá ampiamente citato nel corso dei capitoli precedenti) ha utilizzato (12.06;3992) mentre il prof. C. Habchi ha adottato (29.9548;10876.1).

Tutte tali coppie di valori sono state provate all'interno del nostro modello; quella che ha fornito i risultati piú soddisfacenti é stata (29.9548;10876.1).

E' proprio in base a questa coppia di valori che si sono ottenuti i seguenti risultati.

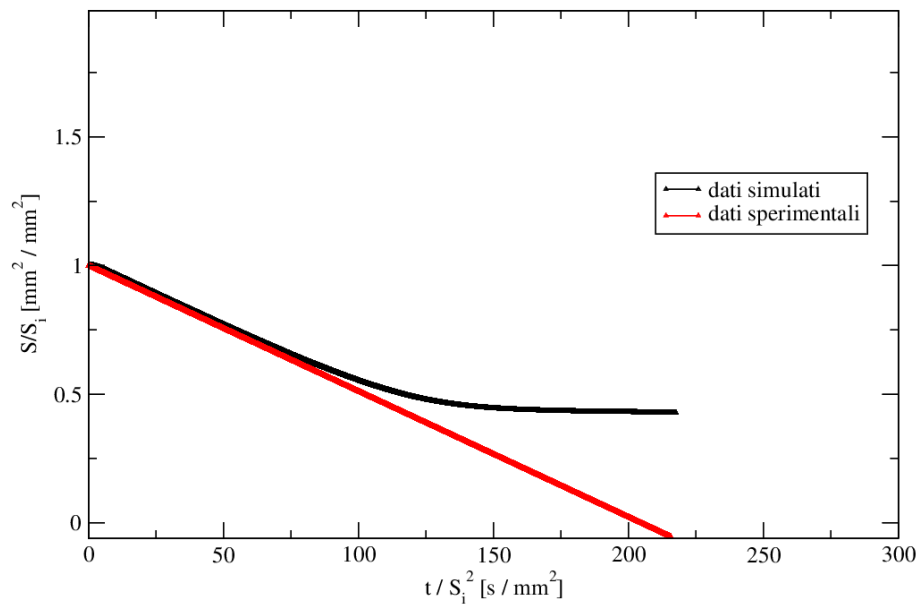


Figura 6.4: Confronto dati simulati-dati sperimentali, 373 K

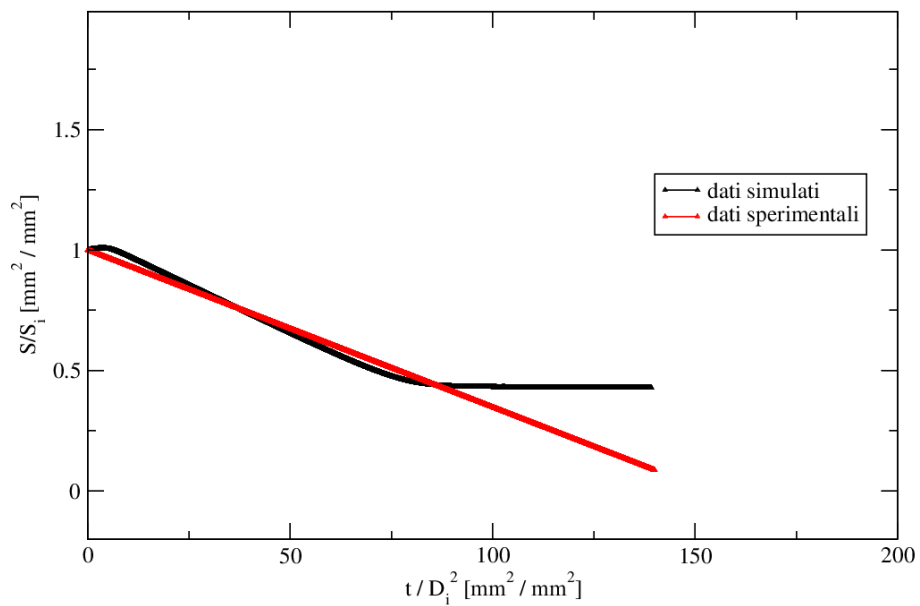


Figura 6.5: Confronto dati simulati-dati sperimentali, 423 K

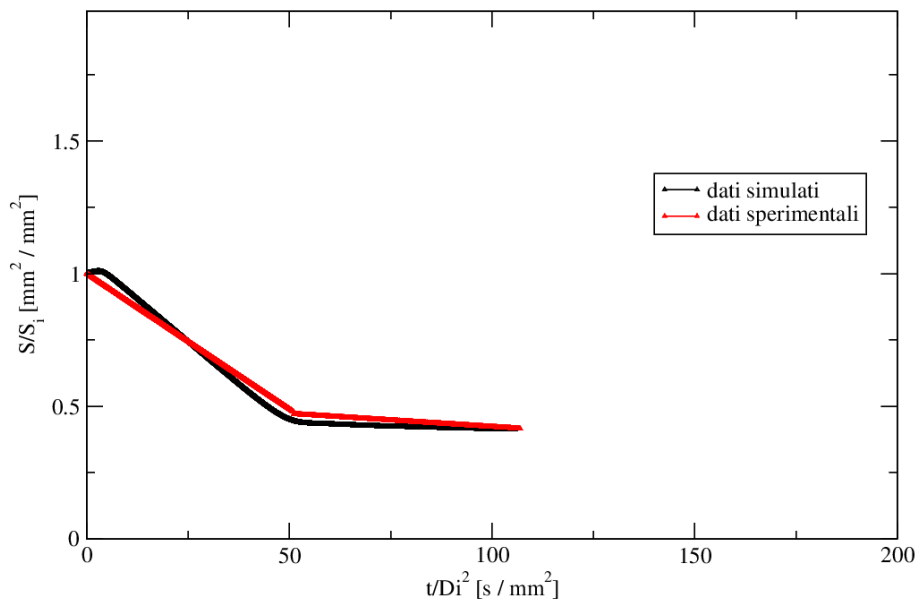


Figura 6.6: Confronto dati simulati-dati sperimentali, 473 K

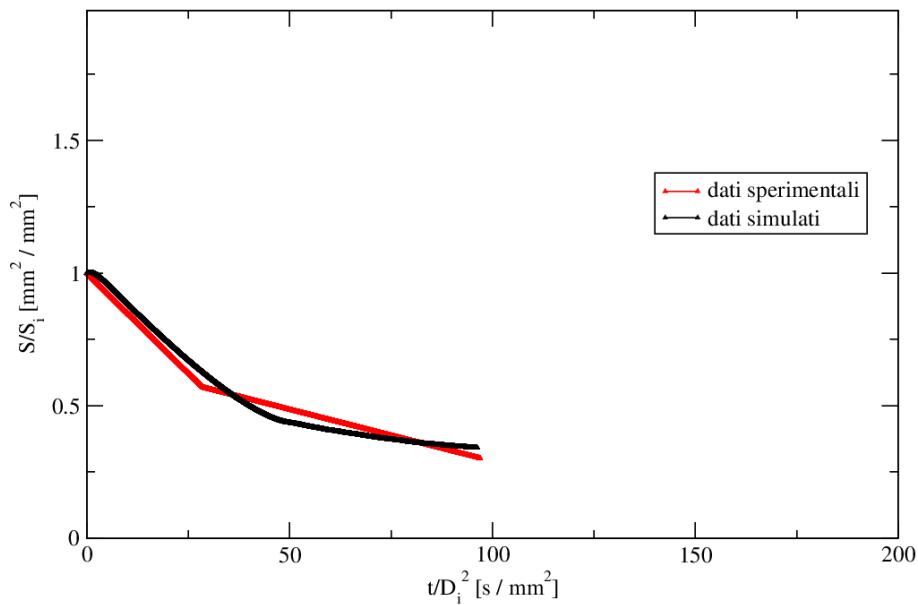


Figura 6.7: Confronto dati simulati-dati sperimentali, 523 K

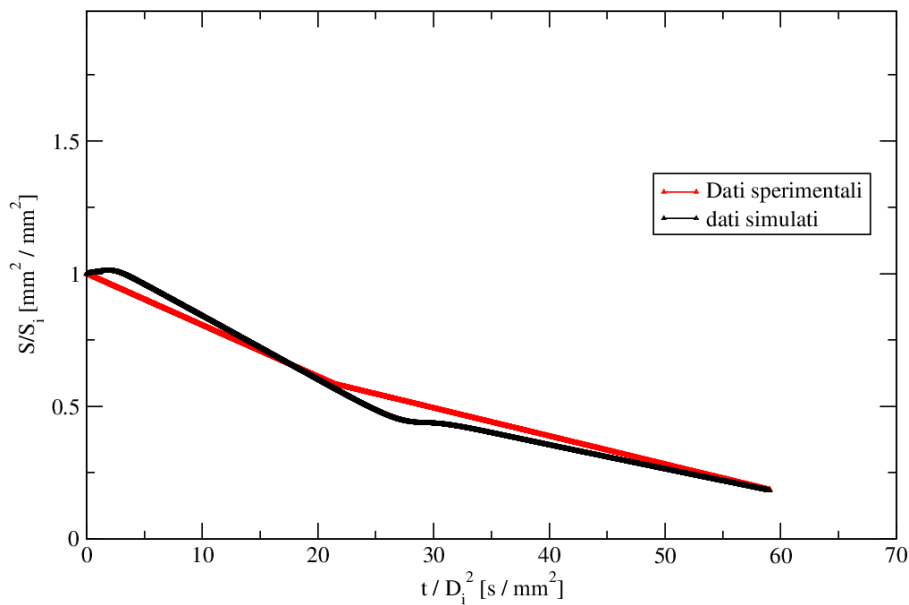


Figura 6.8: Confronto dati simulati-dati sperimentali, 573 K

In generale gli andamenti simulati riproducono in maniera corretta i dati sperimentali. Si possono quindi ricavare le seguenti valutazioni:

1. Per le basse temperature (373 K e 423 K) tutti gli andamenti sperimentali sono rispettati accuratamente. Infatti i coefficienti angolari ricavati sperimentalmente si riferiscono solo all'evaporazione dell'acqua dall'AdBlue (dato che a quelle temperature l'UREA non evapora); si nota quindi che gli andamenti simulati e sperimentali che consentono di valutare la velocità di evaporazione dell'acqua dalla goccia di AdBlue sono in sostanza sovrapposti per il tratto di interesse. Inoltre si verifica (come ci si aspettava) che da un certo tempo in poi le due curve in entrambi i casi divergono in quanto la goccia è composta solo di UREA.
2. Nelle ultime due condizioni di temperatura il confronto con le tendenze stabilite da Wang è attendibile ma c'è da sottolineare che in tali configurazioni la fase relativa principalmente all'evaporazione dell'UREA parte leggermente in ritardo; nonostante ciò il risultato complessivo è certamente soddisfacente.

Nel complesso si ritiene validato in maniera corretta il modello di evaporazione applicato al caso di singola goccia di AdBlue.

6.2 Validazione spray

La validazione dello spray é stata ottenuta in due differenti configurazioni; la prima considera l'iniezione di un getto di acqua e poi di un getto di acqua-UREA all'interno di un ambiente quiescente. La seconda invece consente di validare il modello nel caso di iniezione di acqua/acqua-UREA all'interno di un ambiente con flusso in moto.

Nel primo caso ci si é affidati ai dati forniti dal prof. M. Bhagat[15] nel secondo si é riferiti ad un articolo proposto dal Prof. Birkhold[18].

Per la validazione in ambiente quiescente si é fatto riferimento ad un unico parametro, la penetrazione del getto in quanto questo é l'unico parametro fornito dagli articoli come dato sperimentale. Si sottolinea che questa é stata valutata nelle simulazioni in tutti casi considerati come la distanza fra la posizione dell'ultima parcel uscita dall'iniettore (praticamente coincidente con la posizione dell'iniettore stesso) e la parcel in corrispondenza della quale si verifica che é stato considerato il 99% della massa iniettata.

6.2.1 Validazione modello di evaporazione: ambiente quiescente

Dati sperimentali

I dati sperimentali utilizzati sono, come già detto in precedenza, quelli forniti da un articolo del prof. M. Baghat il quale considera l'iniezione di sola acqua all'interno di un dominio di tipo cubico di lato 100 mm; il parametro di riferimento é stato ovviamente la penetrazione dello spray. Le prove sono state effettuate considerando tre differenti densità dell'ambiente: $\rho_{aria} = 1.1 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{aria} = 2.0 \text{ kg/m}^3$ e $\rho_{aria} = 2.7 \text{ kg/m}^3$.

Nel primo caso la temperatura dell'ambiente era pari a 313 K, nel secondo a 387 K e nel terzo a 423 K; la pressione invece é rispettivamente di 1.1 bar, 2.38 bar e 3.38 bar.

L'iniezione avviene tramite un iniettore commerciale Bosch a 6 fori in modo che il diametro di ogni orifizio sia di $205 \cdot 10^{-6}$ m mentre la lunghezza di ogni orifizio é di $300 \cdot 10^{-6}$ m. L'angolo di apertura del cono é di 30° .

Di seguito si riporta l'immagine dell'iniettore così come rappresentato nel paper:



Figura 6.9: Iniettore Bosch a sei fori

L'iniettore, posto al centro della cella di iniezione, é inclinato di un angolo di 20° rispetto alla verticale; al fine della valutazione della penetrazione tale parametro non é influente in quanto la penetrazione si definisce come la quantità (in termini di lunghezza) per cui il getto penetra all'interno del dominio; considerando che nella nostra configurazione e per il tempo stabilito di iniezione il getto non impatta le pareti del dominio, é possibile assumere che l'inclinazione dell'iniettore non incida sulla valutazione della penetrazione.

La penetrazione del getto per ogni configurazione é stata valutata in un intervallo di tempo che va da 0 a 1.8 ms.

Simulazioni: caso monocomponente

Le simulazioni sono state effettuate per tutte le configurazioni precedentemente considerate. Dato che si é ritenuto ininfluenza l'inclinazione dell'iniettore all'interno del dominio al fine della valutazione della penetrazione del getto é stato possibile considerare semplicemente che essa avvenga assialmente.

Questo é stato considerato di dimensioni maggiori rispetto a quelle del dominio effettivo, in modo da passare da $100 \times 100 \times 100$ mm a $100 \times 100 \times 200$ mm; ciò ha consentito di sovrastimare la lunghezza in direzione dell'asse di iniezione e quindi di evitare qualsiasi tipo di difficoltà derivante da una penetrazione simulata del getto troppo elevata.

Il lato della singola cella di calcolo é stato posto pari a 3 mm; di seguito si riporta una rappresentazione dell'intero dominio di calcolo:

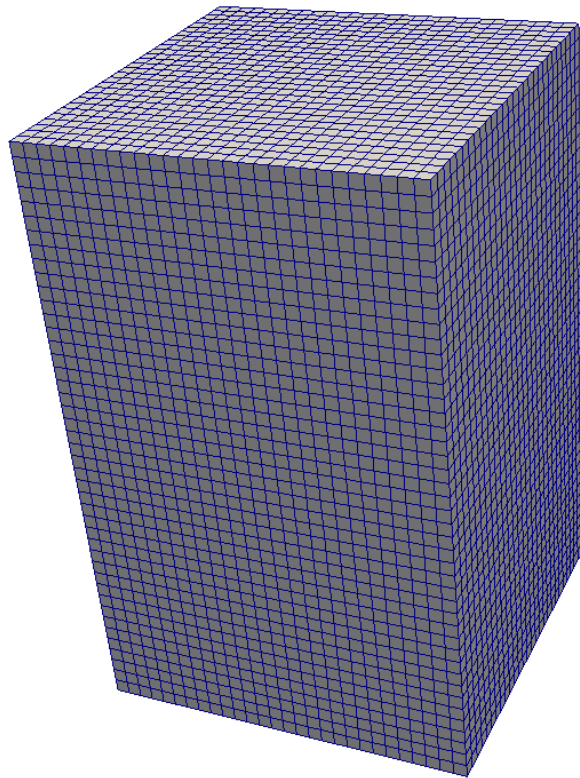


Figura 6.10: Dominio di calcolo caso SAE

Il semiangolo del cono dello spray é stato posto pari a 30° ; inoltre l'articolo (comprensivo di una parte dedicata alla modellazione CFD delle prove sperimentali fatte) ha suggerito i valori delle costanti relative al modello di break Up KH-RT; si riporta in appendice come tali costanti sono state implementate nel codice.

Lo spray é visualizzato tramite l'utility di post-processing paraFoam (si evidenzia che per consentire una migliore visualizzazione tramite tale utility sono state leggermente maggiorate le dimensioni delle gocce):

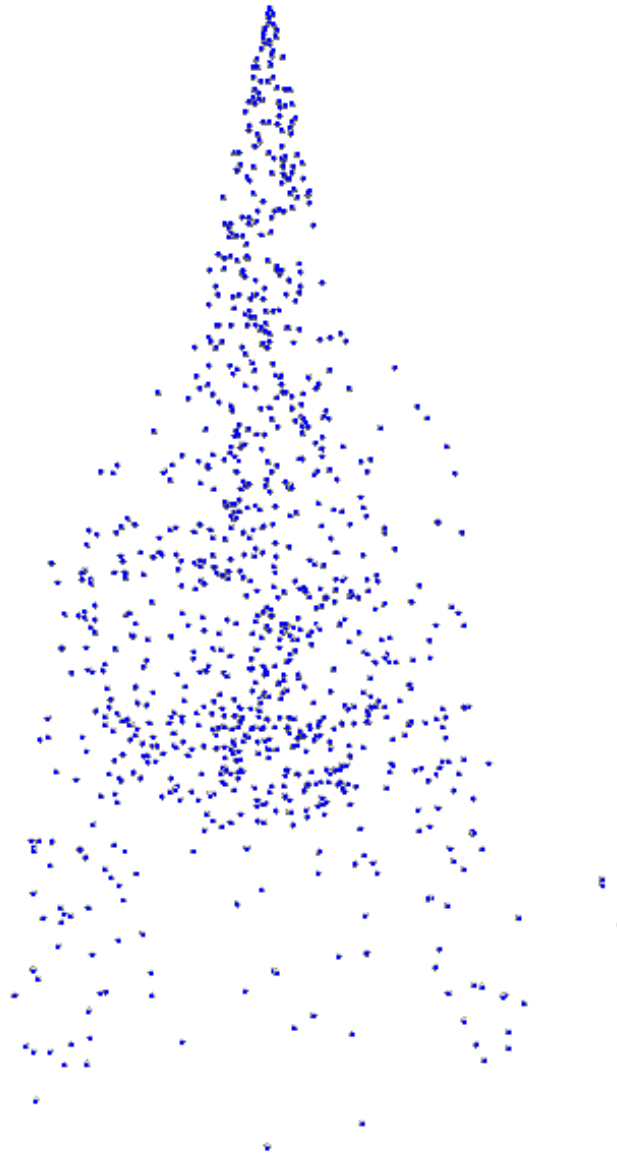


Figura 6.11: Rappresentazione spray caso SAE

I risultati ottenuti in termini di penetrazione del getto confrontati con i dati sperimentali sono i seguenti:

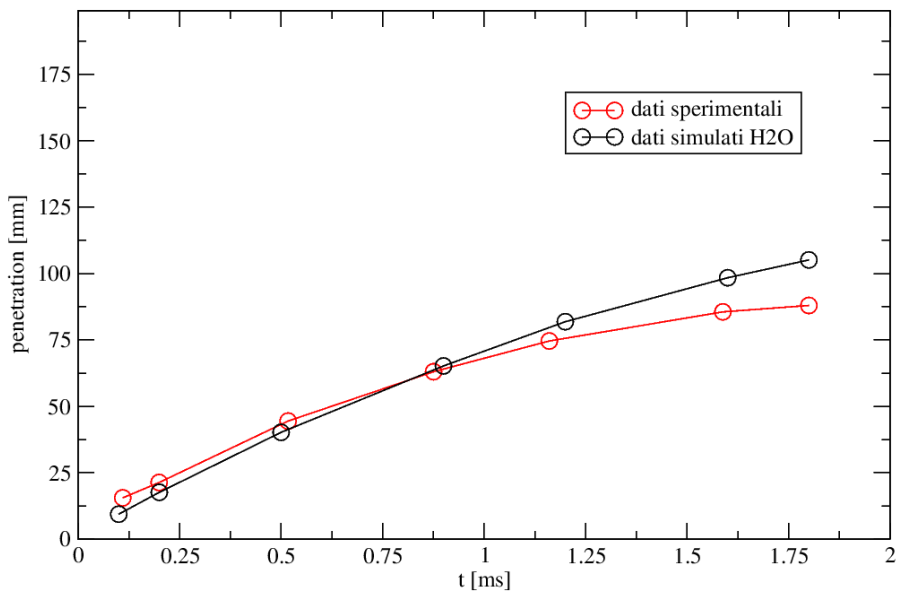


Figura 6.12: Confronto dati simulati-sperimentali caso 1.1 kg/m^3 , acqua

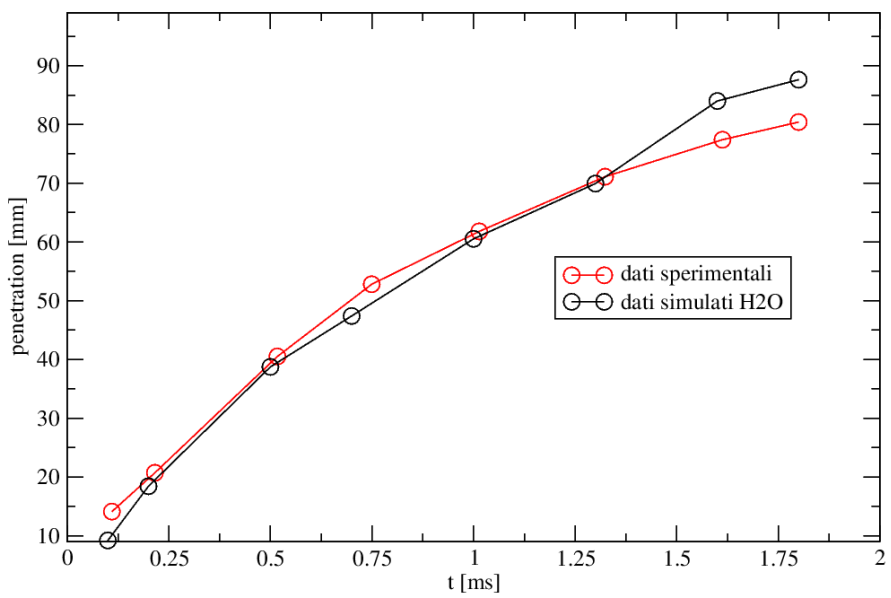


Figura 6.13: Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.0 kg/m^3 , acqua

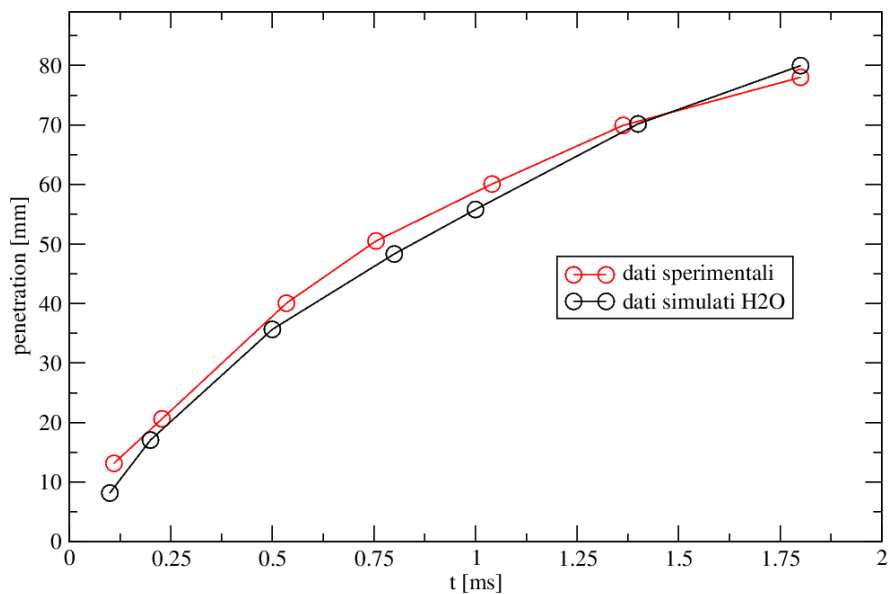


Figura 6.14: Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.7 kG/m^3 , acqua

E' possibile notare nel complesso un rispetto della tendenza imposta dai dati sperimentali; nell'ultima fase si nota una sovrastima del valore della penetrazione. Tale sovrastima, però, diminuisce all'aumentare della densità dell'ambiente nel quale lo spray é iniettato.

Effetto del soluto: caso AdBlue

Al fine di valutare il modello di evaporazione della soluzione acqua-UREA si sono considerate le medesime condizioni di lavoro del caso di iniezione di sola acqua ma considerando ovviamente uno spray di UWS.

I risultati ottenuti sono i seguenti:

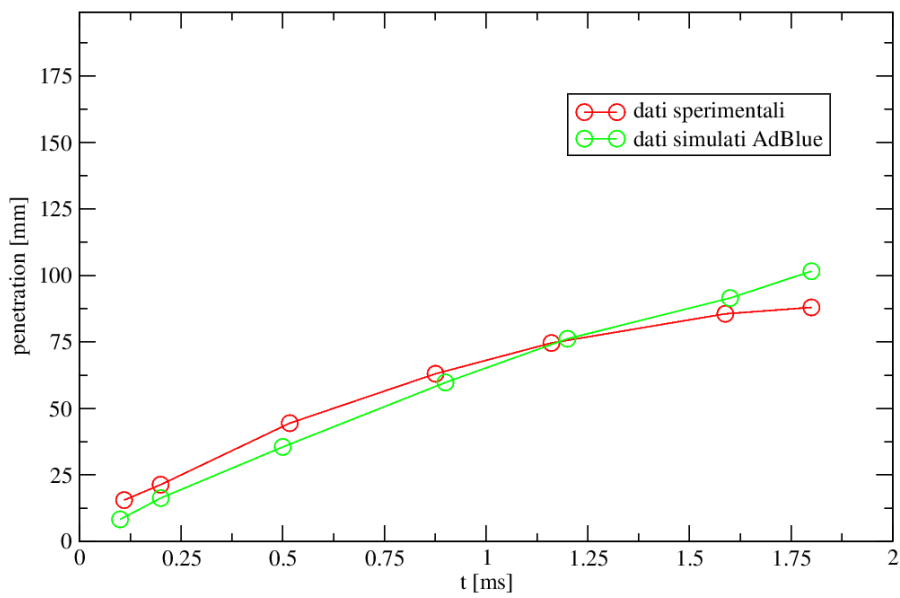


Figura 6.15: Confronto dati simulati-sperimentali caso 1.1 kG/m^3 , UWS

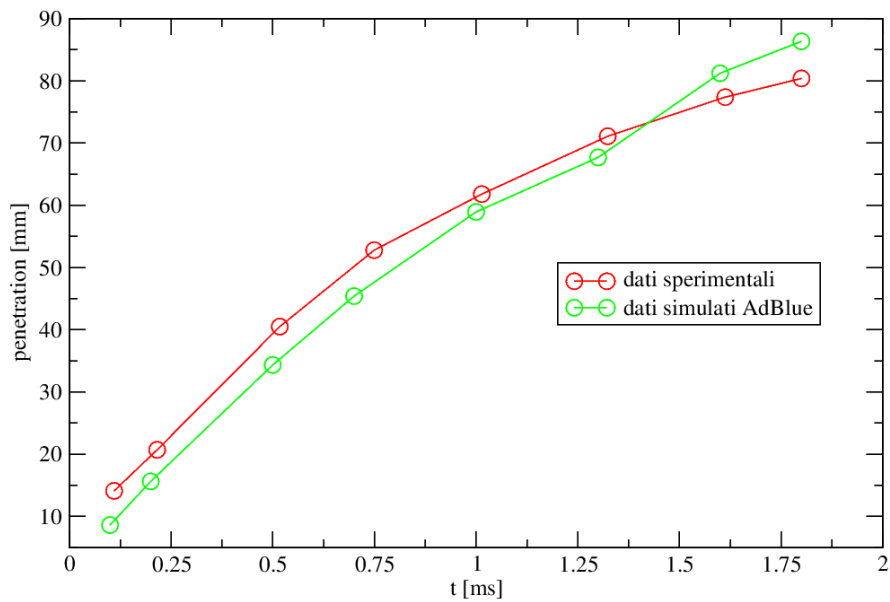


Figura 6.16: Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.0 kG/m^3 , UWS

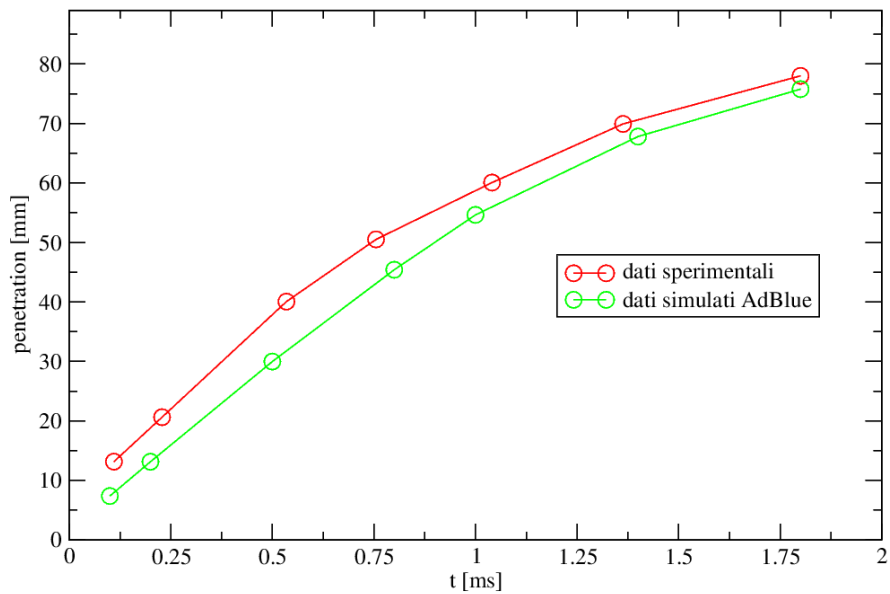


Figura 6.17: Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.7 kG/m^3 , UWS

In realtà di maggiore interesse ai fini della valutazione del modello di evaporazione dell'UWS é il confronto fra i risultati ottenuti considerando uno spray di sola acqua ed uno spray di acqua-UREA; per tal motivo si riportano di seguito tali grafici:

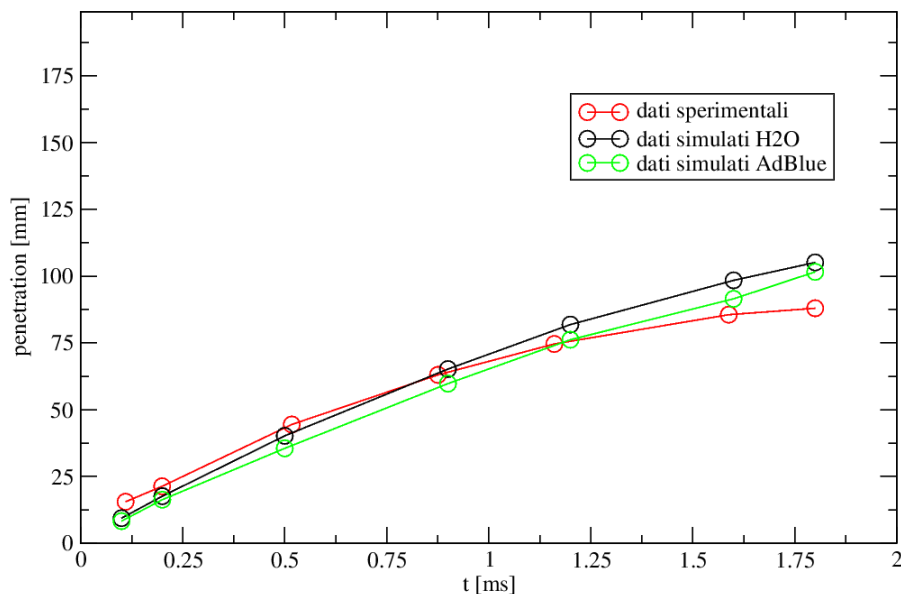


Figura 6.18: Confronto dati simulati-sperimentali caso 1.1 kG/m^3 , UWS

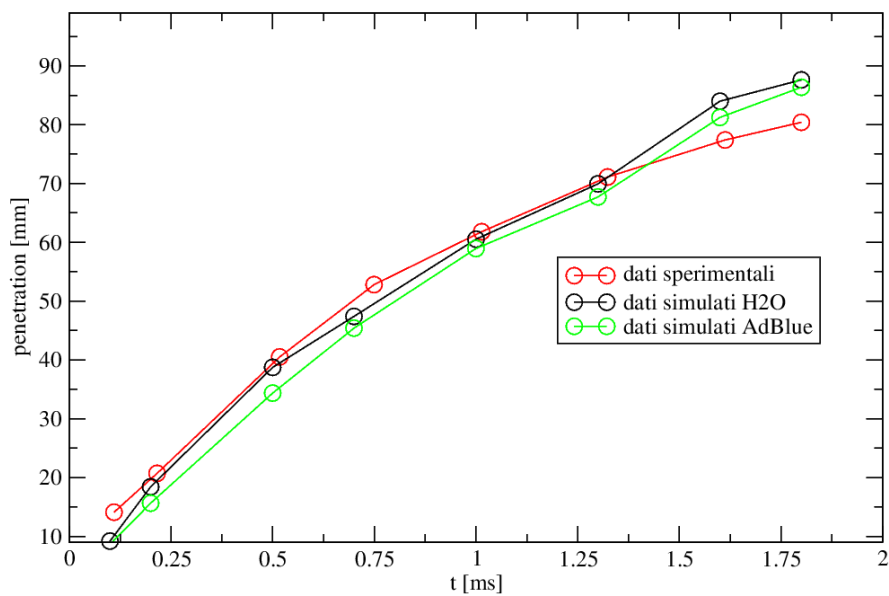


Figura 6.19: Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.0 kG/m^3 , UWS

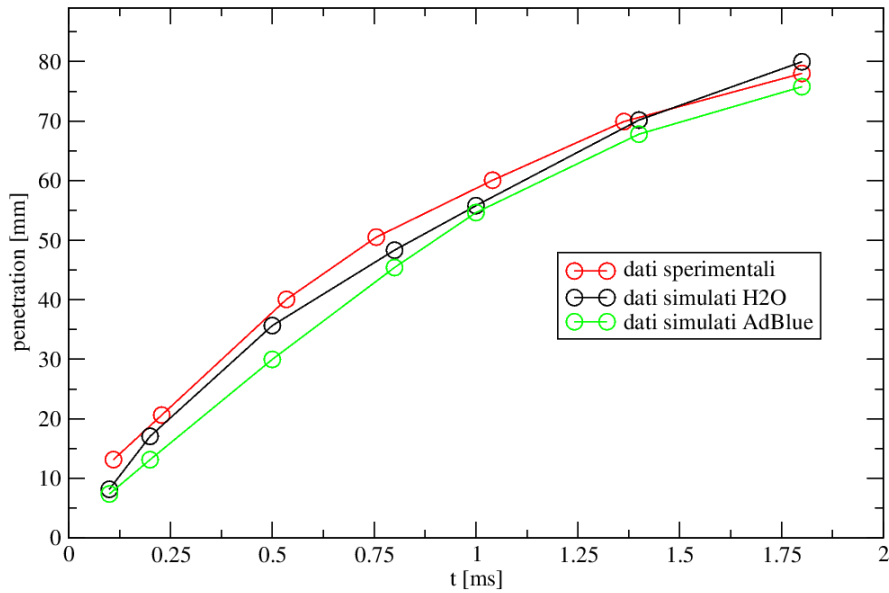


Figura 6.20: Confronto dati simulati-sperimentali caso 2.7 kG/m^3 , UWS

I risultati ottenuti evidenziano una maggiore penetrazione dello spray di sola acqua rispetto a quello di acqua-UREA.

Ciò si motiva sottolineando che, in base alla legge di Bernoulli $p/\rho = v^2/2$ (utilizzata dal codice per calcolare la velocità iniziale del getto), in corrispondenza di una densità maggiore si ottiene una velocità iniziale del getto inferiore; infatti nel caso di getto di sola acqua la velocità di iniezione valutata dal codice è di $111.88m/s$ mentre nel caso di iniezione di acqua-UREA la velocità valutata dal codice è $108.769m/s$.

Inoltre considerando che è sostanzialmente riprodotta la tendenza dei dati sperimentali sia nel caso di spray di sola acqua sia nel caso di spray di UWS e considerando accettabili la complessiva sovrastima della penetrazione in entrambe le configurazioni, si può ritenere soddisfacente il modo in cui il modello di simulazione stima tale fenomeno.

6.2.2 Validazione modello di evaporazione: flusso in moto

Data la mancanza di dati sperimentali circa la penetrazione del getto nel caso di flusso in moto, per una valutazione del comportamento del modello si sono riprodotte le stesse prove presenti in un'articolo[18] proposto dal Prof. Birkhold.

Il dominio considerato è a sezione quadrata (di lato 50 mm) e di lunghezza di 200 mm. Lo spray è iniettato all'interno di un flusso in moto di portata di 9 kG/s (alla velocità di 25 m/s) e alla temperatura di 150 °C; l'angolo di apertura dello spray è di 30 °. Il modello di break up utilizzato è il Reitz KH-RT; le costanti che caratterizzano tale modello sono riportati nella tabella seguente.

Costanti modello di Break up	
B_0	0.61
B_1	10
C_{τ}	1
C_{RT}	0.1
$m_{s,limit}$	0.2
We_{limit}	6

Il dominio è stato discretizzato con una mesh di lato 2.5 mm; essa è rappresentata di seguito:

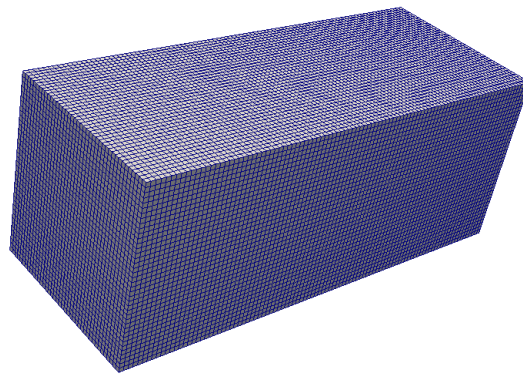


Figura 6.21: Dominio di calcolo caso flusso in moto

L'articolo fornisce una rappresentazione dello spray (sperimentale) 10 ms dopo l'iniezione dello spray stesso; questa rappresentazione é riportata di seguito:



Figura 6.22: Rappresentazione dello spray pubblicato nell'articolo del Prof. Birkhold

In primo luogo si confronta l'immagine di tale spray con quella dello spray ottenuto dalla simulazione (si evidenzia che per consentire una migliore visualizzazione sono state leggermente maggiorate le dimensioni delle gocce per tutti gli spray rappresentati di seguito):

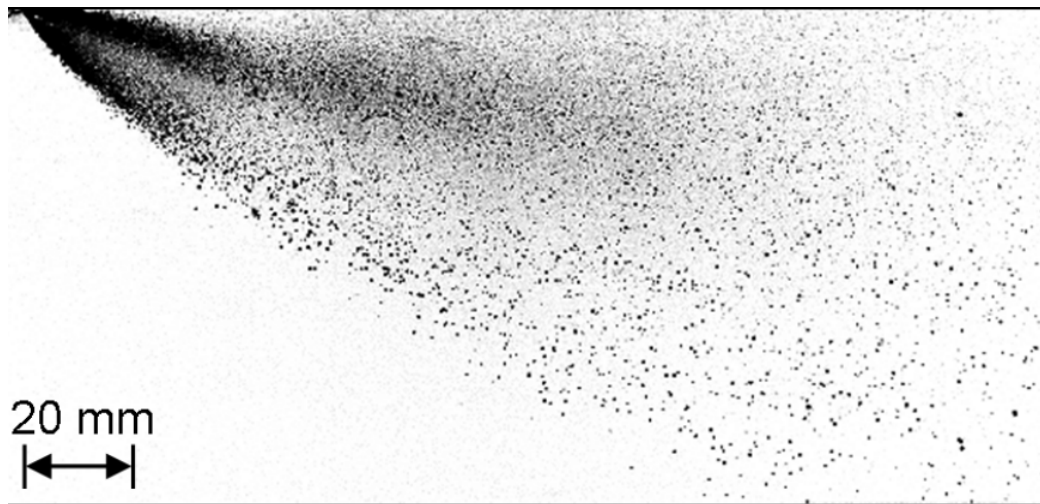


Figura 6.23: Immagine spray sperimentale a 10 ms

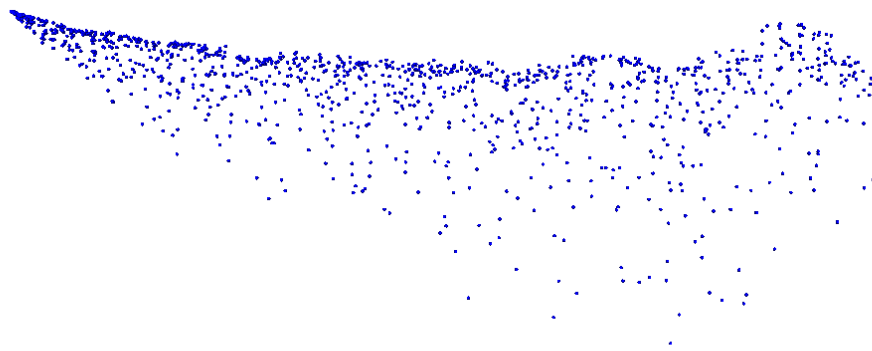


Figura 6.24: Immagine spray simulato

L'angolo di apertura dello spray simulato sottostima leggermente quello simulato ma nel complesso i due si possono considerare simili.

Si sottolinea che per una piú corretta stima del modello la stessa prova é stata effettuata considerando acqua invece di AdBlue; i risultati complessivi ottenuti usando acqua e AdBlue sono riportati di seguito:

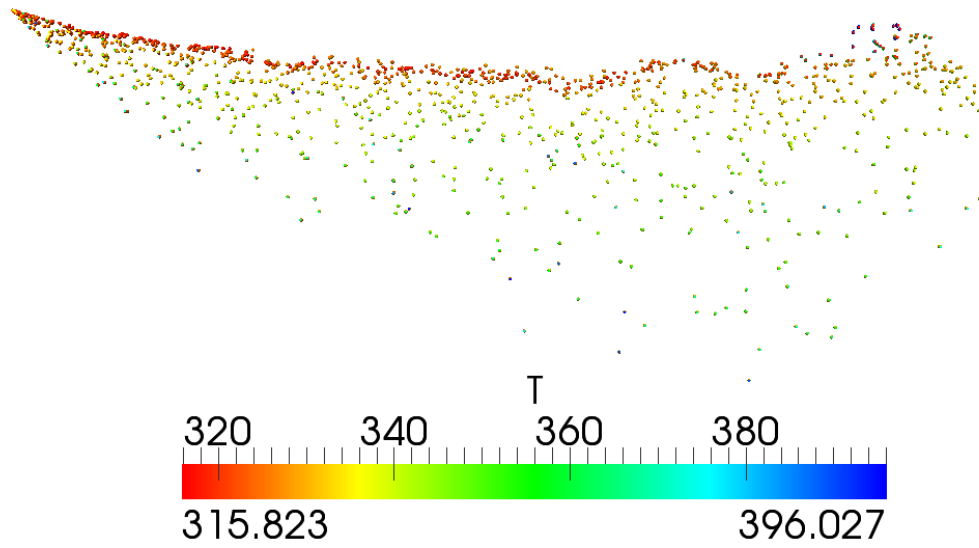


Figura 6.25: Temperatura dello spray a 10 ms

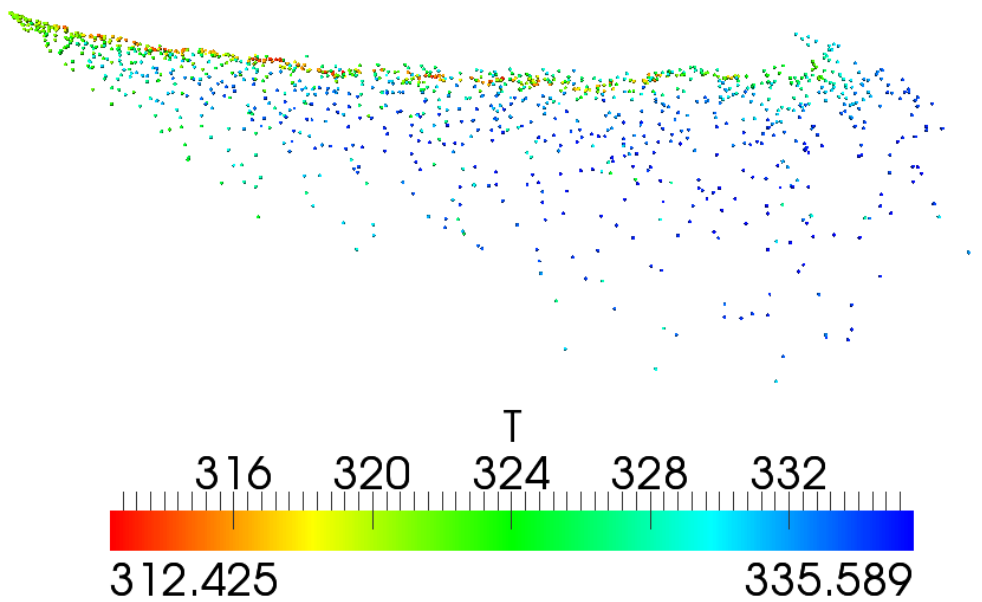


Figura 6.26: Temperatura dello spray a 10 ms, caso acqua

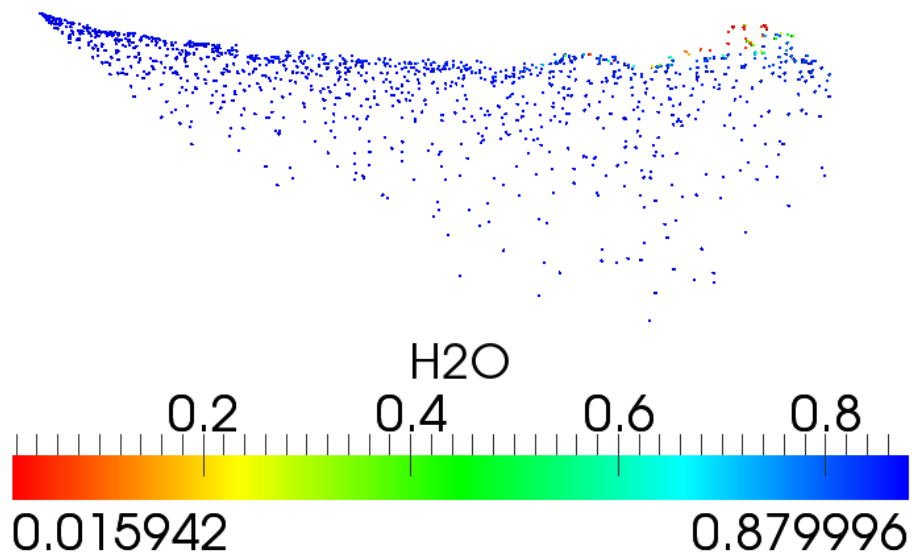


Figura 6.27: Percentuale(in moli) di H_2O all'interno dello spray a 10 ms

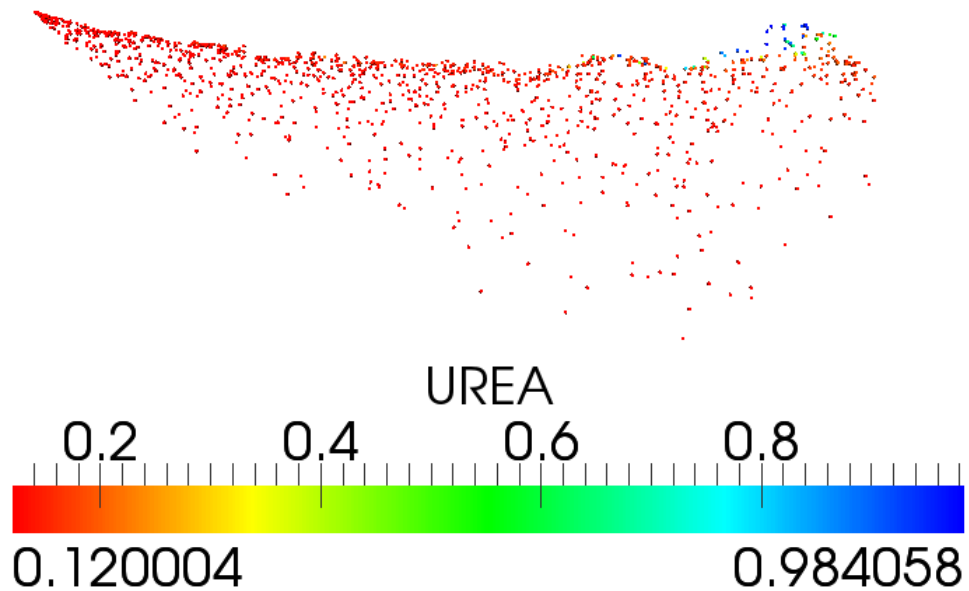


Figura 6.28: Percentuale(in moli) di UREA all'interno dello spray a 10 ms

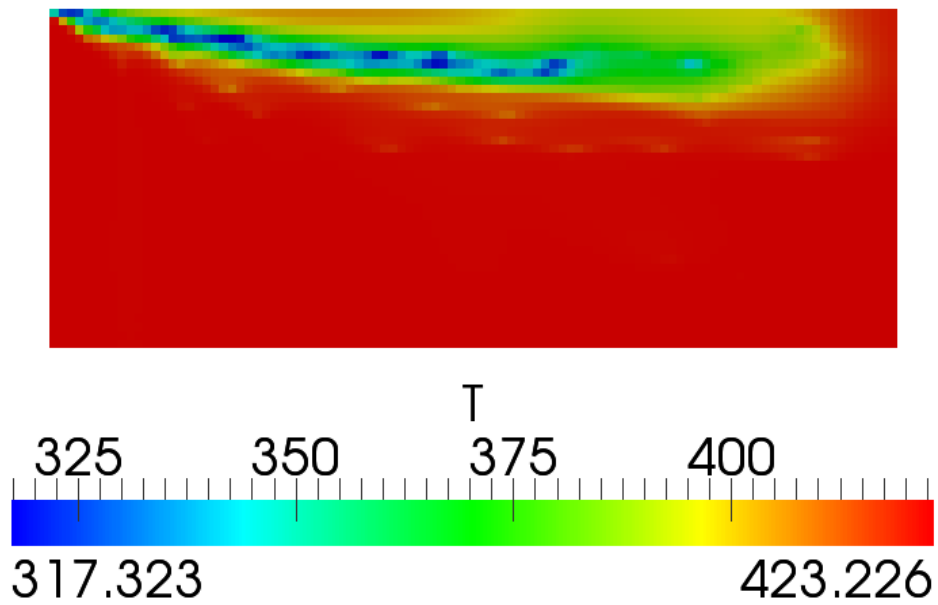


Figura 6.29: Temperatura del gas a 10 ms

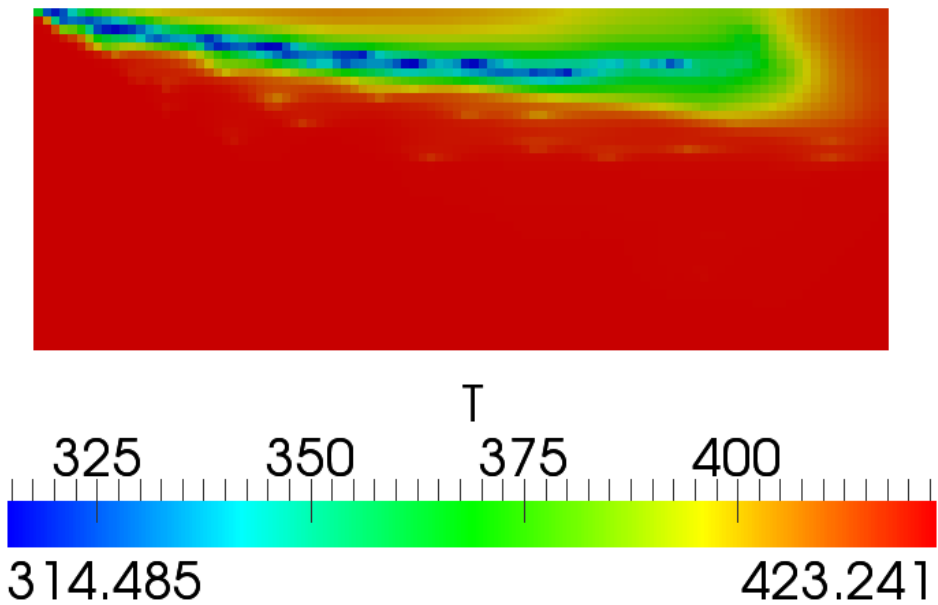
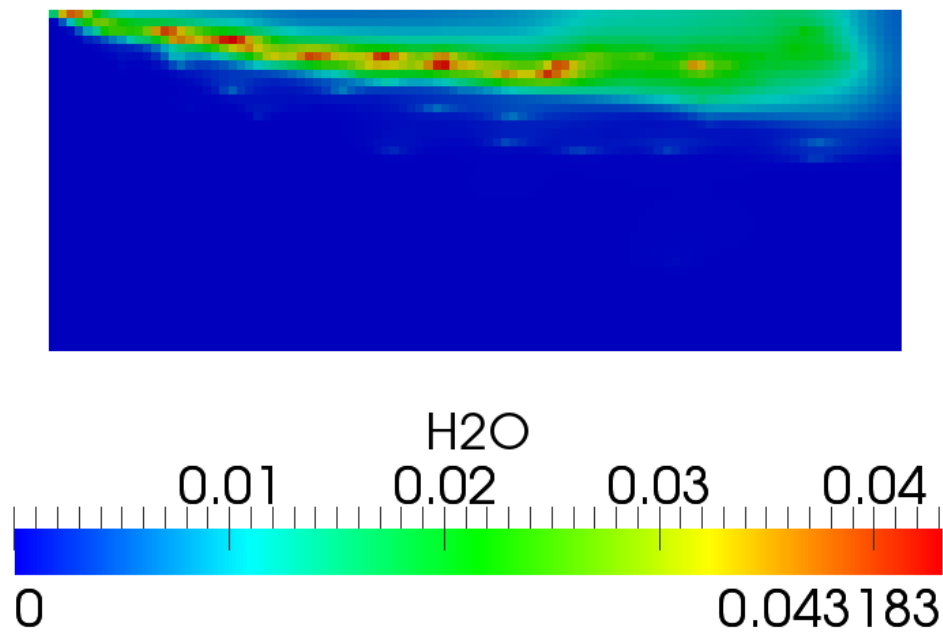
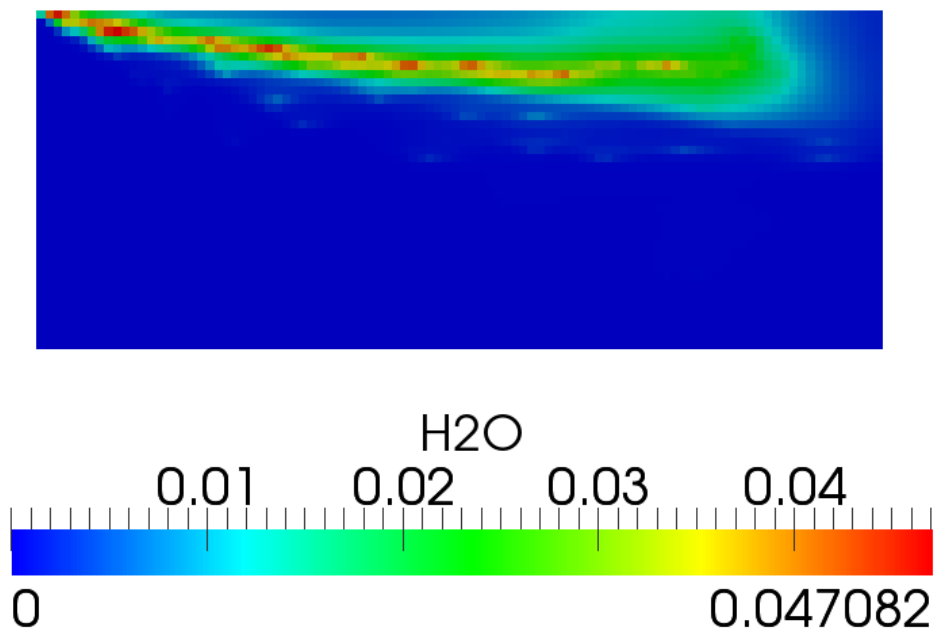


Figura 6.30: Temperatura del gas a 10 ms, caso acqua

Figura 6.31: Percentuale di H_2O all'interno del gas a 10 msFigura 6.32: Percentuale di H_2O all'interno del gas a 10 ms, caso acqua

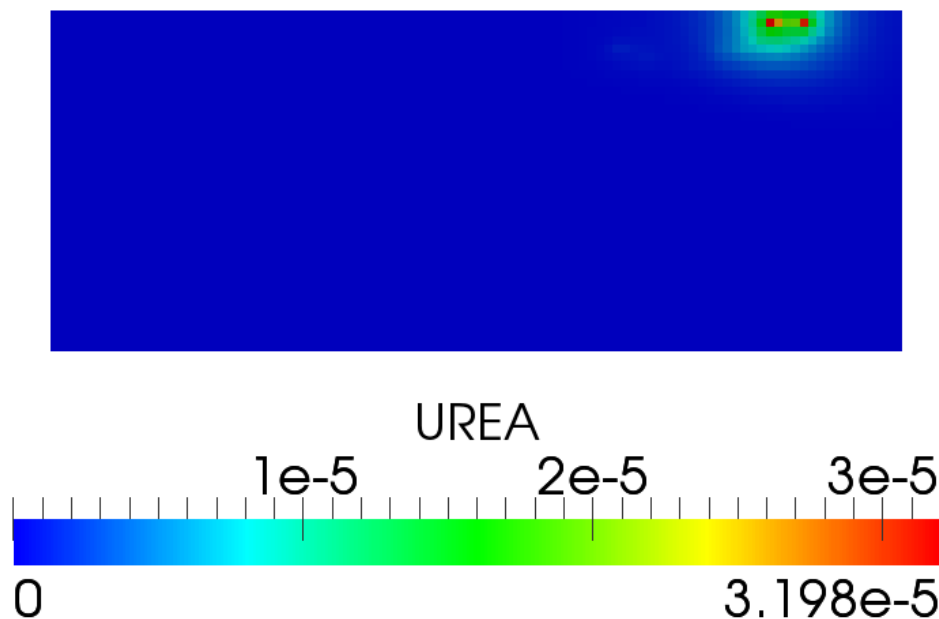


Figura 6.33: Percentuale di UREA all'interno del gas a 10 ms

In primo luogo si sottolinea che i risultati ottenuti per quanto riguarda le aliquote di acqua e UREA presenti nel getto nel caso di iniezione di AdBlue si ritengono plausibili; infatti facendo riferimento alla aliquota di UREA evaporata si verifica che essa evapora solo in corrispondenza delle gocce che hanno raggiunto una temperatura tale da far evaporare praticamente tutta l'acqua presente (coerentemente con quanto riportato nei risultati del caso di evaporazione di singola goccia) e da consentire quindi l'inizio dell'evaporazione del soluto.

Inoltre le temperature raggiunte dallo spray nei due casi verificano quanto precedentemente spiegato; infatti nel caso di iniezione monocomponente (sola acqua) si raggiunge una certa temperatura e poi questa rimane costante mentre nel caso di iniezione di AdBlue l'urea-water-solution aumenta la propria temperatura.

Infine è possibile sottolineare che nel caso di iniezione di acqua abbiamo un'evaporazione maggiore del caso di iniezione di AdBlue. Facendo riferimento a quanto scritto nei capitoli precedenti, si sottolinea che tale risultato è del tutto coerente con quanto teorizzato in quanto nel caso di soluzione si verifica un abbassamento della tensione di vapore dovuto alla presenza del soluto rispetto al caso di iniezione di solo solvente (in tal caso acqua) che comporta una diminuzione della velocità di evaporazione.

Conclusioni

In definitiva si può ritenere attendibile il modello per la valutazione dell'iniezione delle soluzioni acqua-UREA all'interno dei gas di scarico dei motori alternativi a combustione interna. In primo luogo il modello di evaporazione RM si è dimostrato sia adeguato alla simulazione di tale fenomeno sia capace di garantire oneri computazionali non eccessivi. Inoltre al fine di ottenere una corretta simulazione è risultato determinante l'implementazione nel codice di calcolo di una libreria capace di schematizzare correttamente le proprietà dell'UREA (UREAproperties) e le proprietà delle soluzioni acqua-UREA (waterSolutionProperties). In particolare la determinazione della tensione di vapore dell'UREA è stata ottenuta implementando una legge di tipo esponenziale che poi è stata sfruttata per valutare la tensione di vapore complessiva della soluzione in base alla legge di Raoult.

I risultati ottenuti sono stati confrontati con una serie di dati sperimentali che hanno consentito una parziale validazione del modello. In primo luogo, infatti, si è validato il modello nel caso di evaporazione di singola goccia di AdBlue sospesa in un ambiente a pressione costante in modo da effettuare prove al variare della temperatura ambiente da 373 K a 573 K (dati sperimentali forniti dall'articolo del Prof. Wang). In tal caso il modello si ritiene capace di riprodurre correttamente i dati sperimentali. In secondo luogo si è passati alla validazione del modello nel caso di iniezione di spray; si è considerato opportuno distinguere due configurazioni: iniezione di spray all'interno di ambiente quiescente e all'interno di ambiente con flusso in moto.

Nel primo caso ci si è riferiti ai dati sperimentali forniti dall'articolo del Prof. M. Baghat; questi forniva solo dati relativi all'iniezione di acqua. Per tal motivo si è validato prima il modello per il caso di iniezione di sola acqua e poi si è verificato l'effetto del soluto riproducendo le stesse prove ma considerando AdBlue invece di acqua. In entrambe le configurazioni i risultati ottenuti in termini di penetrazione del getto si possono considerare nel complesso accettabili anche se sovrastimano leggermente i dati sperimentali.

In ultima analisi si è validato il modello nel caso di iniezione all'interno di un flusso in moto. A tal fine si è fatto riferimento ad un articolo proposto dal Prof. Birkhold; in tal caso è stata considerata un'unica configurazione di

portata di flusso e temperatura in modo da iniettare in un caso acqua ed in un altro AdBlue (al fine di verificare l'attendibilità del modello di evaporazione passando da soluzione acqua-UREA a solo solvente, acqua). In questo caso i risultati ottenuti sono plausibili e coerenti con la trattazione effettuata nei capitoli precedenti sia nel caso di iniezione di acqua che nel caso di iniezione di AdBlue.

In conclusione quindi si può ritenere che il modello di evaporazione sia utilizzabile per tutte le configurazioni considerate; in realtà a causa della mancanza di dati sperimentali precisi risulta conveniente valutare tale il modello in ulteriori applicazioni con flussi in moto. Inoltre è certamente utile investigare eventuali altre cause che possono portare ai risultati ottenuti nel caso di iniezione di singola goccia per temperature elevate (623 K, 673 K).

Capitolo 7

Appendice

7.1 Implementazione nel codice

```
46 ..
47 namespace Foam
48 {
49
50 /*-----*\
51                      Class liquidProperties Declaration
52 /*-----*/
53
54 class liquidProperties
55 {
56     // Private data
57
58     //- Molecular weight [kg/kmol]
59     scalar W_;
60
61     //- Critical temperature [K]
62     scalar Tc_;
63
64     //- Critical pressure [Pa]
65     scalar Pc_;
66
67     //- Critical volume [m^3/mol]
68     scalar Vc_;
69
70     //- Critical compressibility factor []
71     scalar Zc_;
72
73     //- Triple point temperature [K]
74     scalar Tt_;
75
76     //- Triple point pressure [Pa]
77     scalar Pt_;
78
79     //- Normal boiling temperature [K]
80     scalar Tb_;
```

Figura 7.1: Dichiarazione delle proprietà dell'UREA nel codice

```
40 // * * * * * Constructors * * * * * //
41
42 Foam::UREA::UREA()
43 :
44     liquidProperties
45     (
46         60.056,
47         705.0,
48         9.050e+6,
49         0.218e-3, //0.218,
50         0.337,
51         405.85,
52         9.3131e+1,
53         465.0
54     ),
```

Figura 7.2: Valori assegnati alle proprietà dell'UREA nel codice

```
77
78 public:
79
80     //- Runtime type information
81     TypeName("ureaFunction");
82
83
84     // Constructors
85
86     //- Construct from components
87     ureaFunction
88     (
89         const scalar a,
90         const scalar b
91     );
92
93     //- Construct from Istream
94     ureaFunction(Istream& is);
95
96     //- Construct from dictionary
97     ureaFunction(const dictionary& dict);
98
99
100     // Member Functions
101
102     //- Evaluate the function and return the result
103     scalar f(scalar, scalar T) const
104     {
105         Info << " Calculating custom pv function for UREA " << endl;
106         Info << " a : " << a_ << endl;
107         Info << " b : " << b_ << endl;
108         Info << " T : " << T << endl;
109
110         return exp(a_ + (b_/(T+3.3953e-3)));
111     }
```

Figura 7.3: UREA function


```

213
214 Foam::scalar Foam::waterSolutionProperties::rho
215 (
216     const scalar p,
217     const scalar T,
218     const scalarField& x
219 ) const
220 {
221     scalar Ti = 0.0;
222     scalar y = 0.0;
223
224     forAll(properties_, i)
225     {
226         Info << " components : " << components()[i] << endl;
227         // if (properties_[i].W() > 30)
228         if (components()[i] == "UREA")
229         {
230             Ti = min(TrMax*properties_[i].Tc(), T);
231             y = x[i]*properties_[i].W();
232         }
233     }
234
235     return 1144.5 + 280*y/W(x) - 0.5*Ti;
237 }
238

```

Figura 7.4: Densità dell'UWS implementata nel codice

```

251
252 Foam::scalar Foam::waterSolutionProperties::pv
253 (
254     const scalar p,
255     const scalar T,
256     const scalarField& x
257 ) const
258 {
259     scalar pv = 0.0;
260
261     forAll(properties_, i)
262     {
263         if (x[i] > SMALL)
264         {
265             scalar Ti = min(TrMax*properties_[i].Tc(), T);
266             pv += x[i]*properties_[i].pv(p, Ti); //+= x[i]*properties_[i].pv(p, Ti)*properties_[i].W();
267         }
268     }
269
270     return pv;//pv/W(x);
271
272

```

Figura 7.5: Tensione di vapore dell'UWS implementata nel codice

```

97
98 // API vapour mass diffusivity function using properties from
99 // construction - with specified binary pair
100 scalar f(scalar p, scalar T, scalar Wa) const
101 {
102     const scalar alphaBinary = sqrt(1/wf_ + 1/Wa);
103     return 1.013*(pow(10, -3.5))*(pow(T, 1.75))*alphaBinary/(p*beta_);
104 }
105
106 // Write the function coefficients
107 void writeData(Ostream& os) const
108 {
109     os << a_ << token::SPACE
110        << b_ << token::SPACE
111        << wf_ << token::SPACE
112        << wa_;
113 }
114

```

Figura 7.6: Coefficiente di diffusione binario implementato nel codice

```

176     scalar Td = min(T(), 0.999*fuels.properties()[i].Tc());
177     bool boiling = fuels.properties()[i].pv(pressure, Td) >= 0.999*pressure;

```

Figura 7.7: Condizione di boiling: miscele liquide

```

176     scalar Td = min(T(), 0.999*fuels.properties()[i].Tc());
177     bool boiling = fuels.pv(pressure, Td, X()) >= 0.999*pressure;

```

Figura 7.8: Condizione di boiling: soluzioni

```

153     scalar denominator =
154         6.0*massDiffusionCoefficient
155         *Sh(ReynoldsNumber, SchmidtNumber)
156         *rhoFuelVapor*lgExpr;
157
158     if (denominator > SMALL)
159     {
160         time = max(VSMALL, liquidDensity*sqr(diameter)/denominator);
161     }
162
163     return time;
164 }

```

Figura 7.9: tau evaporation

```

195     time =
196         liquidDensity*cpFuel*sqr(diameter)
197         /(6.0*kappa*Nusselt*log(1.0 + cpFuel*deltaT/max(SMALL, heatOfVapour)));
198
199     time = max(VSMALL, time);
200
201     return time;

```

Figura 7.10: tau boiling

```
381 Foam::scalar Foam::waterSolutionProperties::Cp
382 (
383     const scalar p,
384     const scalar T,
385     const scalarField& x
386 ) const
387 {
388     scalar Cp = 0.0;
389     forAll(properties_, i)
390     {
391         if (x[i] > SMALL)
392         {
393             scalar Ti = min(TrMax*properties_[i].Tc(), T);
394             Cp += x[i]*properties_[i].Cp(p, Ti)*properties_[i].W();
395         }
396     }
397 }
398
399 return Cp/W(x);
400 }
```

Figura 7.11: $c_{p,UWS}$

```
270 ReitzKHRTCoeffs
271 {
272     B0          0.61;
273     B1          24;//10;
274     Ctau        1;
275     CRT         0.6;//0.1;
276     msLimit     0.2;
277     WeberLimit  6;
278 }
```

Figura 7.12: Costanti del modello di break up KHRT, caso iniezione ambiente quiscente

Bibliografia

- [1] G. Ferrari, *Motori a Combustione Interna*, ed. Capitello, 2006.
- [2] J. Heywood. *Internal Combustion Engine Fundamentals*.
- [3] H. K. Versteeg, W. Malalasekera, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, ed. Longmann Scientific and Thecnical, 1995.
- [4] G. Stiesch, *Modeling Engine Spray and Combustion Processes*, ed. Springer, 2003.
- [5] S. B. Pope, *Turbolent Flows*, ed. Cambrige University Press, 2000.
- [6] D. C. Wilcox, *Turbolent Modeling for CFD*, ed. DCW Industries, 2006.
- [7] G. Stiesch, *Modeling Engine Spray and Combustion Processes*, ed. Springer, 2003.
- [8] J. H. Ferziger, M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, ed. Springer, 2001.
- [9] R. Chang, *Chimica Fisica 1*, ed. Zanichelli, 2003.
- [10] Birkhold F., Meingast U., Wassermann P., Deutschumann O. Modeling and simulation of the injection of UREA-water-solution for automotive SCR DeNO_x systems, *Applied Catalysis B: Enviromental*, 2007.
- [11] Vahid Ebrahimian, Andre Nicolle, Chawki Habchi, Detailed Modeling of the Evaporation and Thermal Decomposition of UREA-Water Solution in SCR Systems, *IFP Energies nouvelles*, August 2011.
- [12] Vahid Ebrahimian, Chawki Habchi, Towards a Predective Evaporation Model for Multi-Component Hydrocarbon at all Pressure Conditions, *IFP Energies nouvelles*, June 2010.

- [13] T.J. Wang, S. W. Baek, S.Y. Lee, Experimental Investigation on Evaporation of UREA-Water-Solution Droplet for SCR Applications, *AlChE Journal*, December 2009.
- [14] A. Lundstrom, B. Waldheim, H. Strom, B. Westerberg, Modeling of urea gas phase thermolysis and theoretical details on urea evaporation, *Journal of Automobile Engineering*, September 2011.
- [15] Bhagat M., Cung K., Johnson J., Seong-Joung Lee, Jeffrey Naber, Experimental and Numerical Study of Water Spray Injection at Engine-Relevant Conditions, *SAE International*, April 2013.
- [16] A. M. Bernhard, I. Czekaj, M. Elsener, A. Wokaun, O. Krocher, Evaporation of Urea at Atmospheric Pressure, *The journal of PHYSICAL CHEMISTRY*, March 2011.
- [17] Kontin S., Hoffer A., Koch R., Bauer H.-J., Heat and Mass Transfer accompanied by Crystallisation of single Particles containing Urea-water-Solution, *ILASS*, 2010.
- [18] Birkhold F., Meingast U., Wassermann P., Analysis of the Injection of Urea-water-solution for automotive SCR DeNO_x-Systems: Modeling of Two-phase Flow and Spray/Wall-Interaction, *ILASS*, January 2006.
- [19] Strom H., Lundstrom A., Andersson B., Choise of urea-sprays models in CFD simulations of urea-SCR systems *Chemical Engineering Journal*, 2009.
- [20] Huthwahl G., Schaika V., Bleicker D., Eckel A., The Influence of Urea Droplet Size on the Efficiency of SCR Catalysts for HD-Diesel Engines *Presentation held at AVL International Commercial Powertrain Conference*, 2009.
- [21] Sirignano W. A., Wu G., Multicomponent-liquid-fuel vaporization with complex configuration *International Journal of Heat and Mass Transfer* 2007.
- [22] Ryddner D.T., Trujillo M.F. A Fully Resolved UWS Droplet Simulation *ILASS* 2007.

Lista dei simboli

Lettere latine

\vec{c}	vettore posizione del centroide
c_p	calore specifico a pressione costante
c_v	calore specifico a volume costante
$\underline{\underline{D}}$	tensore delle deformazioni
\overline{D}	diametro del condotto
E	energia interna del fluido
\hat{E}	Energia totale specifica
\hat{E}_k	Energia cinetica specifica
f	coefficiente di attrito
\vec{f}	Forze di campo o volumiche
\vec{F}	Risultante delle forze agenti sulla goccia
\vec{g}	Accelerazione di gravità
H	Entalpia del fluido
\hat{H}	Entalpia specifica del fluido
\hat{H}_s	Entalpia sensibile specifica
\hat{H}_v	Calore latente di vaporizzazione
\underline{I}	Tensore identità
k	Energia cinetica turbolenta
l_{mix}	Lunghezza di miscelazione
\dot{m}	Portata massica
\hat{n}	Versore normale
p	Pressione del fluido
q	Calore scambiato per unità di tempo e di massa
\vec{q}	Flusso di energia
R	Costante equazione di stato dei gas
S	Superficie
T	temperatura del gas
\vec{u}	Velocità del fluido
\vec{V}	Velocità di diffusione
\dot{W}^{Spray}	Sorgente di turbolenza dovuto allo spray
\vec{x}	Vettore posizione
X	Frazione molare
\vec{y}_k	Flusso diffusivo molecolare
Y_f	Frazione massica

Lettere greche

α	Diffusività termica
Γ	Coefficiente di diffusione massico
Γ_{mix}	Coefficiente di diffusione massico nella miscela
Δ	Variazione
ε	Tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta
λ	Secondo coefficiente di viscosità
μ	Viscosità dinamica
λ_t	Conduttività termica
ρ	densità del fluido
$\underline{\underline{\tau}}$	tensore degli sforzi
τ_b	Tempo caratteristico dell'ebollizione
τ_e	Tempo caratteristico dell'evaporazione
ϕ	Generica grandezza

Apici e Pedici

d	diffusivo, goccia
k	k-esima specie chimica
l	liquido
n	componente normale
ref	grandezza di riferimento
t	termico, turbolento
'	Componente fluttuante secondo Reynolds
''	Componente fluttuante secondo Favre
+	Grandezza adimensionale di strato limite
-	Componente mediata secondo Reynolds