

POLITECNICO DI MILANO

FACOLTÀ DI INGEGNERIA INDUSTRIALE E DELL'INFORMAZIONE

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Energetica



**Analisi e ottimizzazione di un approccio a flumelet instazionari
per la previsione di fiamme turbolente non-premiscelate**

Relatore: Prof. Gianluca D'ERRICO

Tesi di laurea di:

Matteo D'ELIA

Matricola 801201

Anno Accademico 2013 - 2014

*Let us imagine ourselves seated
comfortably on the top of the piston,
at or about the end of the compression stroke.*

*We are in complete darkness,
the atmosphere is a trifle oppressive...
Suddenly, above our heads a valve is opened
and a rainstorm of fuel leaves in a gale...*

*For a while nothing startling happens,
the rain continues to fall,
the darkness remains intense.*

*Then suddenly, away to our right perhaps,
a brilliant gleam of light appears
moving swiftly and purposefully;
in an instant this is followed
by a myriad others all around us,
some large and some small,
until on all sides of us the spaces is filled
with a merry blaze of moving lights...*

Sir Harry R. Ricardo's romantic description of combustion in Diesel engines.

Indice

Indice	ix
Elenco delle figure	xi
Elenco delle tabelle	xiii
Elenco degli acronimi	xv
Sommario	xvii
Abstract	xix
Introduzione	1
1 La combustione nei motori Diesel	3
1.1 Tipologie di fiamme	4
1.2 Modello concettuale di combustione nei motori Diesel	5
1.3 Equazioni di trasporto per flussi reagenti	9
1.3.1 Equazione di continuità	9
1.3.2 Equazione di trasporto delle specie chimiche	9
1.3.3 Equazione di trasporto della quantità di moto	9
1.3.4 Equazione di trasporto dell'energia	10
1.3.5 Medie alle Reynolds e medie alle Favre	10
1.3.6 Modelli di turbolenza	12
1.4 Modelli di combustione nei motori Diesel	14
1.4.1 Characteristic Time-scale Combustion model	14
1.4.2 Well-mixed model con integrazione diretta	15
2 Il modello RIF	17
2.1 Laminar flamelet concept	17
2.1.1 Mixture fraction	18
2.1.2 Laminar flamelet equations	21
2.1.3 Scalar dissipation rate	22

2.2	Representative Interactive Flamelet model	23
2.2.1	Parametri per la soluzione delle equazioni nel dominio flamelet	24
2.2.2	Probability Density Function	25
2.2.3	Integrazione delle frazioni massiche e della temperatura	25
2.2.4	Inizializzazione del dominio flamelet	26
3	I modelli mRIF	29
3.1	Eulerian Particle Flamelet model	29
3.2	Interactive Eulerian Particle Flamelet model	30
3.2.1	Attack interaction model	31
3.2.2	PDF-weighted interaction model	32
3.3	Criteri di suddivisione dei domini chimici	34
3.3.1	Criteri basati sulla varianza dello scalar dissipation rate	34
3.3.2	Criteri basati sulla massa di combustibile iniettato	35
3.4	Inizializzazione dei domini chimici	36
3.4.1	Clone	36
3.4.2	NoClone	37
4	Il solver RIFdieselFoam	39
4.1	<i>OpenFOAM</i>	39
4.2	<i>Lib-ICE</i>	40
4.3	RIFdieselFoam	42
4.4	Engine Combustion Network	43
4.4.1	Caratteristiche degli esperimenti in bomba	43
4.5	Analisi fondamentale basata sulla campagna sperimentale Spray H	44
4.5.1	Condizioni termodinamiche	44
4.5.2	Mesh	45
4.5.3	Iniezione di combustibile	47
4.5.4	Solver chimico	49
4.5.5	Schemi cinetici per la combustione del n-eptano	51
4.5.6	Analisi dei risultati	52
5	La campagna sperimentale Spray A	71
5.1	Analisi basata sulla campagna sperimentale Spray A	71
5.1.1	Condizioni termodinamiche	71
5.1.2	Mesh	72
5.1.3	Iniezione di combustibile	72
5.1.4	Solver chimico	73
5.1.5	Schemi cinetici per la combustione del n-dodecano	73
5.1.6	Analisi dei risultati	75
5.2	Tecniche di riduzione dei tempi di calcolo	97

Indice	vii
5.2.1 <i>Virtual Species</i>	98
5.2.2 Frozing	99
5.2.3 Merging	103
6 Il modello mRIF e i motori Diesel	107
6.1 Legge di iniezione multipla	107
6.2 Analisi dei risultati dei casi motore	119
Conclusioni	127
A Analisi di sensitività del modello RIF	129
A.1 Imposizione di un unico valore di ChiStMean	129
A.2 Imposizione di variazioni della turbulence-chemistry interaction	134
Bibliografia	139

Elenco delle figure

1.1	Evoluzione dei limiti di emissioni imposte dalle norme Euro.	3
1.2	Esempio di fiamma diffusiva, [10].	5
1.3	Tipologie di fiamme in motori a combustione interna, [4].	6
1.4	Pressione, AHRR e sollevamento dello spillo dell'iniettore, [15].	6
1.5	Evoluzione del processo di combustione in una fiamma Diesel, [15].	7
1.6	Evoluzione del processo di fiamma fredda, [3].	8
1.7	Fiamma quasi-stazione in regime mixing-controlled, [15].	8
1.8	Generiche reazioni dello Shell model, [10].	14
2.1	Schema illustrativo del laminar flamelet concept, [4].	17
2.2	Trasformazione del dominio fisico al dominio chimico, [16].	21
2.3	Illustrazione schematica di un bruciatore controcorrente, [16].	22
2.4	Struttura del Representative Interactive Flamelet model.	23
2.5	Esempi di β -PDF.	26
2.6	Inizializzazione del dominio flamelet.	27
4.1	Struttura base di <i>OpenFOAM</i> , [26].	40
4.2	Struttura base della <i>Lib-ICE</i>	41
4.3	Struttura base del solver <i>RIFdieselFoam</i>	42
4.4	Fotografia dell'esterno della bomba Sandia, [28].	43
4.5	Schema e fotografia dell'interno della bomba Sandia, [28].	44
4.6	Formula di struttura e geometria del n-eptano.	45
4.7	Dominio CFD utilizzato per le simulazioni in bomba.	46
4.8	Dominio flamelet utilizzato per le simulazioni in bomba.	46
4.9	Legge di iniezione raccomandata e misurata.	48
4.10	Confronto tra lunghezze di penetrazione calcolate e misurate.	50
4.11	Struttura dell'algoritmo TDAC, [31].	51
4.12	Andamento di ChiStMean per i tre meccanismi cinetici utilizzati.	53
4.13	Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate.	53
4.14	Confronto tra pressure rise rate sperimentale e calcolate.	54
4.15	Chemiluminescenza a 1 ms e 1.5 ms, [28].	54

4.16	T e <i>OH</i> con diversi meccanismi cinetici (0.0010 s).	55
4.17	T e <i>OH</i> con diversi meccanismi cinetici (0.0015 s).	56
4.18	Andamento a gradino di ChiStMean.	58
4.19	Ignition delay in funzione del ChiStMean.	59
4.20	Temperatura massima nel dominio <i>Z</i> con lo schema Lu-Law.	59
4.21	Temperatura massima nel dominio <i>Z</i> con lo schema Liu-Pitsch.	60
4.22	Temperatura massima nel dominio <i>Z</i> nei casi Clone e NoClone 5 flamelet.	61
4.23	T e <i>OH</i> con criterio di inizializzazione Clone (0.0010 s).	62
4.24	T e <i>OH</i> con criterio di inizializzazione Clone (0.0015 s).	63
4.25	T e <i>OH</i> con criterio di inizializzazione NoClone (0.0010 s).	64
4.26	T e <i>OH</i> con criterio di inizializzazione NoClone (0.0015 s).	65
4.27	Confronto tra lunghezza di lift-off Clone e NoClone.	67
4.28	Confronto tra curve di pressione Clone e NoClone.	67
4.29	Confronto tra curve di pressione Clone.	68
4.30	Confronto tra curve di pressione NoClone.	69
5.1	Formula di struttura e geometria del n-dodecano.	72
5.2	Legge di iniezione generata utilizzando l'utility sviluppata dal CMT.	73
5.3	Confronto tra penetrazione del vapore calcolata e misurata.	74
5.4	Emissione luminosa naturale a 0.75 ms e 1.25 ms.	76
5.5	T e <i>OH</i> calcolati con il modello RIF singolo flamelet (0.00075 s).	76
5.6	T e <i>OH</i> calcolati con il modello RIF singolo flamelet (0.00125 s).	77
5.7	T e <i>OH</i> calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (0.00075 s).	78
5.8	T e <i>OH</i> calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (0.00125 s).	79
5.9	T e <i>OH</i> calcolati con il meccanismo cinetico Faravelli (0.00075 s).	80
5.10	T e <i>OH</i> calcolati con il meccanismo cinetico Faravelli (0.00125 s).	81
5.11	Confronto tra Lift-Off Length sperimentale e calcolate.	82
5.12	Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate.	82
5.13	Confronto tra pressure rise rate sperimentale e calcolate.	83
5.14	Confronto tra curve di pressione sperimentale e calcolate.	84
5.15	T e <i>OH</i> calcolati con il modello di interazione Attack.	85
5.16	Frazione di massa rappresentata dai flamelet e cumulata.	86
5.17	Apparato sperimentale utilizzato nei laboratori dell'ECN.	87
5.18	Rilevazioni PLIF di formaldeide e immagini schlieren.	87
5.19	<i>Z</i> e frazione massica di CH_2O (0.0003 s).	88
5.20	<i>Z</i> e frazione massica di CH_2O (0.0004 s).	89
5.21	<i>Z</i> e frazione massica di CH_2O (0.0005 s).	90
5.22	Scatter plot della frazione massica di formaldeide.	91
5.23	Rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH e immagini schlieren.	92
5.24	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0008 s).	93

5.25	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0017 s).	94
5.26	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0019 s).	95
5.27	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0021 s).	96
5.28	Confronto tra massa totale di soot sperimentale e calcolate.	97
5.29	Struttura del modello RIF con approccio <i>Virtual Species</i> .	98
5.30	Evoluzione della temperatura massima dei domini flamelet.	101
5.31	Evoluzione degli scalar dissipation rate stechiometrico medio.	102
5.32	Evoluzione delle progress variable dei domini flamelet.	102
5.33	Successione degli eventi di frozing dei domini flamelet.	103
5.34	Successione degli eventi di merging dei domini flamelet.	105
6.1	Legge di iniezione generata utilizzando l'utility sviluppata dal CMT.	108
6.2	Chemiluminescenza e campo di temperatura (0.0003 s).	109
6.3	Chemiluminescenza e campo di temperatura (0.0009 s).	109
6.4	Chemiluminescenza e campo di temperatura (0.00115 s).	110
6.5	Chemiluminescenza e campo di temperatura (0.00175 s).	110
6.6	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0007 s).	112
6.7	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0010 s).	113
6.8	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0012 s).	114
6.9	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0015 s).	115
6.10	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0017 s).	116
6.11	$\rho_s f_v$ e frazione massica di CH_2O (0.0021 s).	117
6.12	Legge di rilascio del calore calcolate.	118
6.13	Mesh al TDC dei motori studiati.	119
6.14	Legge di iniezione del caso motore heavy duty al punto operativo B50.	121
6.15	T e OH calcolati nel motore heavy duty.	122
6.16	T e OH calcolati nel caso in bomba equivalente.	123
6.17	T e OH calcolati nel motore ottico.	124
6.18	T e OH calcolati nel caso in bomba equivalente.	125
A.1	Confronto tra scalar dissipation rate medio stechiometrico.	130
A.2	Confronto tra curve di pressione OneChiStMean.	131
A.3	T e OH con un unico valore di ChiStMean (0.0010 s).	132
A.4	T e OH con un unico valore di ChiStMean (0.0015 s).	133
A.5	T e OH (0.0010 s) per i casi con variazione del modello RIF.	135
A.6	T e OH (0.0015 s) per i casi con variazione del modello RIF.	136
A.7	Distribuzione dei temperatura nel dominio Z con scalar dissipation rate.	137
A.8	Distribuzione dei temperatura nel dominio Z senza scalar dissipation rate.	137

Elenco delle tabelle

1.1	Costanti di aggiustamento per il modello $k - \varepsilon$ standard.	13
4.1	Condizioni termodinamiche del caso Spray H studiato.	45
4.2	Tabella riassuntiva degli schemi cinetici per n-eptano.	51
5.1	Caratteristiche dell'iniettore 210370.	72
5.2	Tabella riassuntiva degli schemi cinetici per n-dodecano.	75
5.3	Range dei valori di soglia utilizzati per il merging dei flamelet.	104
6.1	Caratteristiche dei motori analizzati in questo capitolo.	119
6.2	Condizioni termodinamiche ed operative dei casi motore studiati.	120

Elenco degli acronimi

AHRR	Apparent Heat Release Rate
ASM	Algebraic Stress Model
ASOI	After Start Of Injection
ATDC	After Top Dead Centre
CAD	Crank Angle Degree
CCM	Chemistry Coordinate Mapping
CFD	Computational Fluid Dynamics
ChiStMean	scalar dissipation rate stochiometrico medio
CTC	Characteristic Time-scale Combustion model
DAC	Dynamic Adaptive Chemistry
DI	Direct Injection
DNS	Direct Numerical Simulation
DRG	Directed Relation Graph
ECN	Engine Combustion Network
EGR	Exhaust Gas Recirculation
EOI	End Of Injection
EPFM	Eulerian Particle Flamelet Model
gIMEP	gross Indicated Mean Effective Pressure
IEPFM	Interactive Eulerian Particle Flamelet
ISAT	In Situ Adaptive Tabulation
IVC	Inlet Valve Closing

KHRT	Kelvin Helmholtz Rayleigh Taylor instability
LES	Large Eddy Simulation
LTC	Low Temperature Combustion
mRIF	multiple Representative Interactive Flamelet model
NASA	National Aeronautics and Space Administration
ODE	Ordinary Differential Equation
OpenFOAM	Open Field Operation and Manipulation
PAH	Polycyclic Aromatic Hydrocarbon
PDF	Probability Density Function
PIMPLE	merged PISO-SIMPLE
PISO	Pressure Implicit with Splitting Operators
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence
RANS	Reynolds Average Navier Stokes
RIF	Representative Interactive Flamelet model
RoHR	Rate of Heat Release
RPM	Rotations Per Minute
RSM	Reynolds Stress Model
SDR	Scalar Dissipation Rate
SIBS	Semi-Implicit Burlish-Stoer
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations
SNL	Sandia National Laboratories
SOI	Start Of Injection
TDAC	Tabulation of Dynamic Adaptive Chemistry
TDC	Top Dead Centre
UHC	Unburned Hydrocarbons

Sommario

In questo lavoro di tesi si è analizzato il processo di combustione nei motori Diesel a iniezione diretta con il modello Representative Interactive Flamelet (RIF), sia in configurazione singolo flamelet che in quella multiple flamelet (mRIF). Questo modello di combustione, basato sul laminar flamelet concept, è stato precedentemente implementato all'interno della libreria *OpenFOAM* sviluppata dal ICE Group del Politecnico di Milano per simulare i processi che intervengono nei motori a combustione interna che va sotto il nome di *Lib-ICE*. Partendo dalle rilevazioni sperimentali in reattori a volume costante, messe a disposizione dal network di centri di ricerca per lo studio del processo di combustione nei motori a combustione interna ECN (Engine Combustion Network), si è inizialmente studiato il comportamento del modello al variare del meccanismo cinetico e del numero di flamelet utilizzati. Si è poi passati all'analisi del fenomeno di accensione, combustione a bassa temperatura, stabilizzazione, transizione alla fase ad elevata temperatura ed emissione di particolato: investigando le capacità di previsione del modello si è potuto constatare che il modello RIF con un numero elevato di flamelet, inizializzati indipendentemente l'uno dall'altro, è in grado di cogliere con precisione i principali aspetti dell'intero processo. Parallelamente all'analisi del processo di combustione sono state sviluppate e implementate tre tecniche di riduzione dei tempi di calcolo: l'approccio *Virtual Species*, il frozing e il merging dei flamelet permettono l'utilizzo di un numero elevato di flamelet senza eccessivi aggravii sull'onere computazionale, abbattuto complessivamente fino al 75%. Successivamente si è indagato il comportamento del modello in applicazioni con legge di iniezione complessa, per poi concludere con l'analisi di due casi motore e dei casi in reattore a volume costante equivalenti.

Parole chiave: CFD, Combustione, Diesel, Flamelet instazionari, RIF, Inizializzazione indipendente dei flamelet.

Abstract

This thesis is focused on the CFD modeling of Diesel combustion in direct injection reciprocal engines by means of Representative Interactive Flamelet model (RIF), either using single flamelet or multiple flamelet (mRIF). This model is based on the laminar flamelet concept, and it was previously implemented by the ICE group of Politecnico di Milano inside the *OpenFOAM* library named *Lib-ICE*. This investigation is carried on comparing the experimental measurements in constant volume vessel provided by the Engine Combustion Network (ECN) with the numerical results in order to understand the influence of the reaction mechanism and the number of flamelet on the modeled flame structure. In the second part of this work the focus is shifted on modeling ignition, low-temperature combustion, stabilizzation, high-temperature combustion and soot emissions: according to numerical results, mRIF model with independent initialization of flamelet approach is able to predict all the main features of flame structure. In order to reduce the increase of CPU time caused by high number of flamelet required, three CPU time reduction techniques are developed and implemented, named *Virtual Species* approach, freezing flamelet approach and merging flamelet approach, reaching 75% overall CPU time saving. At the end of this work, multiple injections, engine and equivalent constant volume vessel cases are modeled to investigate the behavior of the RIF model in complex phenomena.

Keywords: CFD, Combustion, Diesel, Unsteady flamelet, RIF, Independent initialization of flamelet.

Introduzione

La combustione è da sempre il processo di conversione dell'energia più utilizzato dall'uomo, che ne adopera l'incredibile versatilità nei più svariati campi, dall'utilizzo domestico alla produzione di potenza in grandi centrali termoelettriche passando per la trazione di autoveicoli, navi e aerei. La crescente sensibilità dell'opinione pubblica per le tematiche ambientali ha imposto vincoli sempre più stringenti per le emissioni di inquinanti derivanti dal processo di combustione (CO_2 , CO , UHC , NO_x e soot), comportando il dispiegamento di ingenti risorse in modo da soddisfare le richieste della comunità internazionale.

Lo sviluppo della potenza di calcolo e di nuovi modelli sempre più accurati ha fatto sì che la modellazione CFD entrasse a far parte del set di strumenti indispensabili durante la fasi di progettazione, ricerca e sviluppo. La combustione rimane comunque uno tra i più complessi fenomeni da modellare, vista l'intima interazione tra fluidodinamica, termodinamica e chimica che la caratterizza, concentrando quindi gli sforzi di numerosi centri di ricerca nella formulazione di modelli sempre più affidabili.

Il parallelo sviluppo delle tecniche a disposizione delle campagne sperimentali ha permesso di raggiungere una conoscenza sempre più profonda del processo di combustione, fornendo allo stesso tempo materiale utile per la validazione dei modelli numerici di combustione: il network di centri di ricerca ECN (Engine Combustion Network) del Sandia National Laboratories (SNL) ha come obiettivo principale il continuo incontro e confronto di tutti i più importanti istituti internazionali che si occupano di combustione, raccogliendo e condividendo un ampio database di rilevazioni sperimentali, utilizzati anche in questo lavoro, e risultati numerici.

L'obiettivo di questo lavoro è analizzare il processo di combustione in fiamme turbolente non-premiscelate, nel caso specifico dei motori Diesel, utilizzando un approccio a flamelet instazionari, il modello Representative Interactive Flamelet (RIF). Questo modello di combustione, già implementato all'interno della libreria *Lib-ICE* sviluppata dal gruppo di Motori a Combustione Interna del Politecnico di Milano e basata sul software open source *OpenFOAM*, nasce dal concetto di laminar flamelet e permette il disaccoppiamento tra dominio fisico e dominio chimico, rappresentato da uno o più flamelet, rendendo possibile l'utilizzo di meccanismi cinetici complessi senza un eccessivo aggravio sui tempi di calcolo ed integrando l'interazione tra chimica e turbolenza. Questa analisi, portata avanti grazie al confronto con le rilevazioni sperimentali fornite dall'ECN sulle prove in reattori a vo-

lume costante, ha permesso di mettere in evidenza i pregi e i limiti del modello RIF e di analizzare come le diverse grandezze influenzino le soluzioni ottenute con questo modello. Per ultimo, si è verificato il comportamento del modello nel caso di simulazioni all'interno di un motore, analizzando analogie e differenze della struttura di fiamma con l'equivalente soluzione in reattore a volume costante.

Questo lavoro è organizzato in sei capitoli:

- nel capitolo 1 viene presentata una distinzione dei regimi di combustione, un modello concettuale di combustione nei motori Diesel per poi passare a una breve descrizione delle equazioni di trasporto per flussi reagenti e dei modelli di combustione CTC e well-mixed
- nel capitolo 2 viene presentato il laminar flamelet concept e il modello Representative Interactive Flamelet
- nel capitolo 3 vengono presentati i modelli multiple Representative Interactive Flamelet (EPFM e IEPFM) descrivendo successivamente i possibili approcci per la suddivisione dei diversi domini flamelet e per la loro inizializzazione.
- nel capitolo 4, dopo una breve descrizione di *OpenFOAM*, della *Lib-ICE* e dell'ECN, vengono presentati i risultati delle simulazioni basati sulla campagna sperimentale Spray H, investigando il comportamento del modello al variare del meccanismo cinetico, del numero di flamelet e del criterio di inizializzazione
- nel capitolo 5 vengono presentati i risultati delle simulazioni basati sulla campana sperimentale Spray A, investigando le capacità di previsione del modello in termini di ignizione, combustione a bassa temperatura, stabilizzazione e transizione alla fase di combustione ad alta temperatura, per poi presentare tre tecniche di riduzione dei tempi di calcolo, l'approccio *Virtual Species*, il frozing e il merging dei flamelet, sviluppati e implementati in questo lavoro che permettono di ridurre l'onere computazionale legato all'integrazioni delle β -PDF e dei sistemi ODE dei meccanismi cinetici
- nel capitolo 6 vengono presentati i risultati delle simulazioni con legge di iniezione multipla per poi passare al confronto tra casi motore e casi in reattori a volume costante equivalenti

Capitolo 1

La combustione nei motori Diesel

A partire dal 1997, con l'introduzione del protocollo di Kyoto, la comunità internazionale ha iniziato a prendere provvedimenti per fronteggiare il problema dell'inquinamento atmosferico.

Negli anni sono state formulate numerose strategie di intervento, tutte concordanti sull'importanza dell'abbattimento delle emissioni derivanti dal settore dei trasporti [1]. Proprio in quest'ottica sono entrate in vigore numerose norme, ultima a livello europeo la norma Euro VI, atte a regolare le emissioni inquinanti derivanti dall'autotrazione.

Il progressivo restringimento dei vincoli emissivi ha indotto le case automobilistiche e le compagnie petrolifere ad un imponente lavoro di ricerca: le prime hanno studiato e commercializzato negli anni carburanti sempre più puliti, ad esempio eliminando quasi completamente la presenza di zolfo e di composti pesanti, le seconde hanno studiato veicoli sempre più performanti, compatti ed ecologici, dotati di sistemi di abbattimento delle emissioni sempre più efficaci.

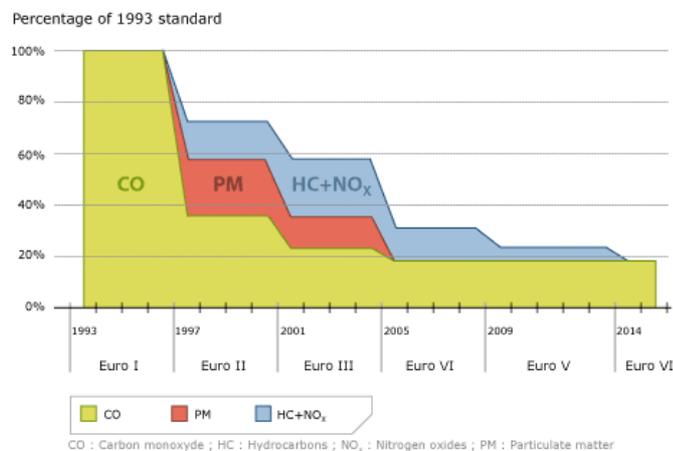


Figura 1.1: Evoluzione dei limiti di emissioni imposte dalle norme Euro.

Cruciale per raggiungere questi obiettivi sono stati i progressi nello studio della combustione: fin dagli albori del tempo l'uomo ha investigato con ogni mezzo quello che tutt'ora

è considerato il primo tra i processi di conversione dell'energia. Negli ultimi decenni, parallelamente alle procedure sperimentali, sempre utili e indispensabili nell'analisi di fenomeni complessi come le fiamme, a preso piede l'utilizzo di metodi numerici, e con essi le simulazioni CFD (Computational Fluid Dynamics): grazie alla infinita versalità dei metodi computazionali si posso infatti studiare sistemi in cui interagiscono contemporaneamente fenomeni di trasporto, sia di quantità di moto (fluidodinamica), che di energia (scambio termico) e di massa, reazioni chimiche, interazione fluido-struttura fino ad arrivare alla magnetoidrodinamica.

La fase di combustione all'interno di un motore è fortemente influenzata dal campo di moto della carica nel cilindro, dalle condizioni termodinamiche e dalla cinetica delle reazioni di ossidazione del combustibile, rendendo così difficile una profonda comprensione delle interazione tra le grandezze in gioco con la sola analisi sperimentale, a meno di non usare sistemi di acquisizione laser in motori ottici, come in [2] e [3]. Grazie a questi sistemi è infatti possibile ottenere misure dettagliate del campo di moto, della distribuzione delle specie chimiche e più in generale delle condizioni all'interno della camera di combustione.

Per quanto i dati ricavati dalle rilevazioni ottiche siano estremamente interessanti e utili per formulare sempre più precisi e dettagliati modelli concettuali in grado di spiegare ogni fase del processo di combustione, è difficile applicare queste tecniche all'interno della fase di progettazione di un nuovo motore, visto l'elevato onere, sia in termini di tempo che di costi, che una campagna sperimentale di questo tipo implica.

In generale poi, l'analisi sperimentale spesso mal si interfaccia con le tipiche analisi di sensitività, connesse a variazioni delle condizioni operativi o di dettagli geometrici, indispensabili all'interno dell'iter progettuale. L'analisi CFD, d'altro canto, ha proprio come punto di forza la possibilità di modificare in ogni istante, praticamente senza aggravii di alcun tipo, qualsiasi dettaglio, sia esso geometrico od operativo, risultando così un utile strumento in tutta la fase di progettazione.

1.1 Tipologie di fiamme

Prima di entrare nel dettaglio dei metodi numerici utilizzati, è utile descrivere meglio le tipologie di fiamme in un motore, concentrandoci poi su quelle presenti in motori Diesel.

Come detto, il processo di combustione in un motore è fortemente influenzato dalle condizioni operative, dalla natura chimico-fisica del combustibile utilizzato, dalle condizioni di miscelamento della carica aria-combustibile e dall'interazione tra cinetica chimica, turbolenza e diffusione molecolare.

Fondamentale è la distinzione tra fiamme premiscelate, omogenee e non-premiscelate (dette anche diffusive): nel primo caso ossidante e combustibile si trovano entrambi in fase gassosa e uniformemente distribuiti prima dell'accensione, nel secondo invece la carica è eterogeneamente distribuita ma interamente gassosa, mentre nel terzo i reagenti sono eterogenei sia come distribuzione che come stato fisico di aggregazione. In base alle condi-

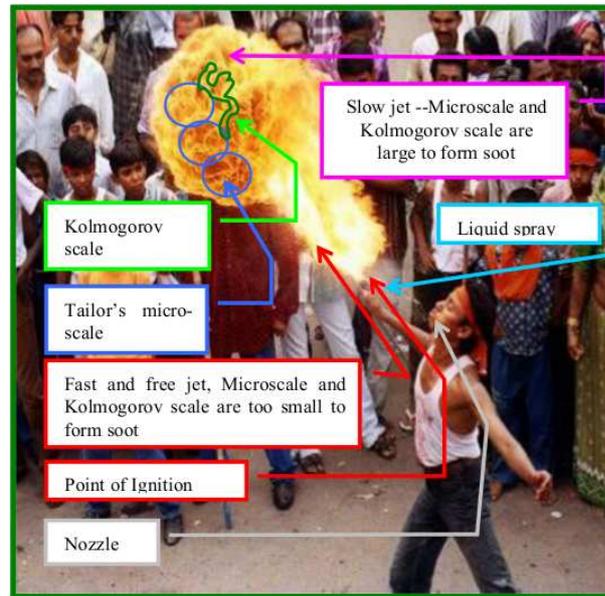


Figura 1.2: Esempio di fiamma diffusiva, [10].

zioni di moto della carica, le fiamme si possono ulteriormente dividere in fiamme laminari e fiamme turbolente. In un motore il campo di moto è sempre turbolento, restringendo così il campo d'interesse alle sole:

- fiamme turbolente premiscelate
- fiamme turbolente omogenee
- fiamme turbolente non-premiscelate

Viste le sostanziali differenze, ogni tipologia di fiamma necessita differenti modelli per descrivere in maniera completa e dettagliata l'intero fenomeno. In figura 1.3, sono riportati i tipici regimi di fiamma associate a diversi motori ed in diverse regimi di funzionamento [4]: i motori Diesel a iniezione diretta ricadono in una condizione intermedia tra fiamme omogenee e fiamme non-premiscelate, con una forte prevalenza del secondo regime di combustione.

1.2 Modello concettuale di combustione nei motori Diesel

Prima di iniziare a parlare dei modelli numerici di combustione nei motori Diesel, è necessario introdurre il fenomeno attraverso dei modelli concettuali. L'importanza di una descrizione fenomenologica dell'intero processo è legata alla necessità di avere modelli numerici in grado di simulare correttamente ogni fase del complesso processo di combustione.

A partire dai primi modelli concettuali formulati da Ricardo risalenti alla prima metà del ventesimo secolo, numerosi progressi sono stati fatti, soprattutto grazie all'utilizzo di motori ottici e di strumenti di rilevazione laser.

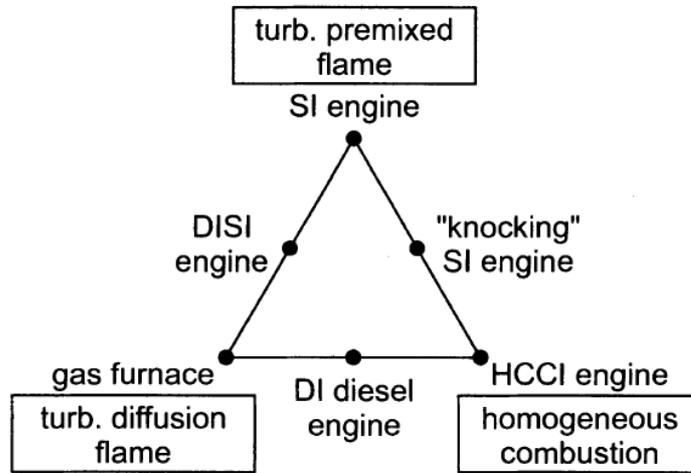


Figura 1.3: Tipologie di fiamme in motori a combustione interna, [4].

Sfruttando proprio le misurazioni laser, Dec ha proposto in [14] un dettagliato modello concettuale, rivisto poi da Musculus in [15], estendendolo anche ai regimi parzialmente miscelati e a bassa temperatura (LTC).

Partendo proprio da [15], il processo di combustione in un motore Diesel può essere efficacemente descritto dalla figura 1.5, in cui sono rappresentati la struttura di fiamma in diversi istanti temporali a partire dall'inizio dell'iniezione (After Start of Injection).

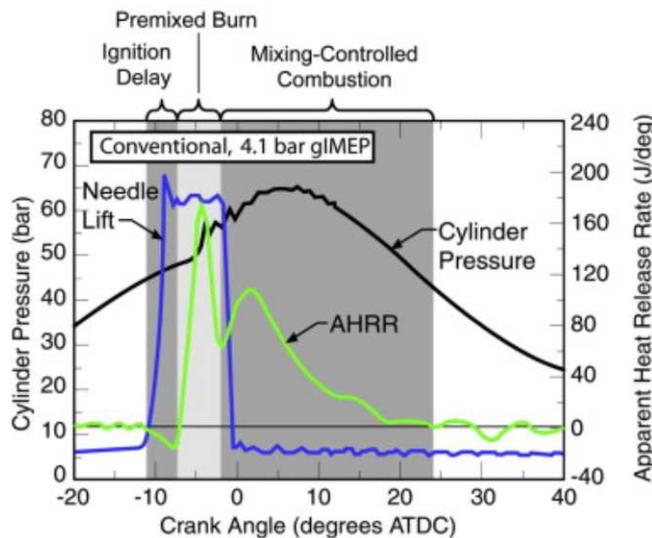


Figura 1.4: Pressione, rilascio del calore e sollevamento dello spillo dell'iniettore, [15].

Inizialmente lo spray si trova interamente in fase liquida, penetrando rapidamente nella camera di combustione con una tipica conformazione conica: dopo un breve lasso di tempo nelle zone periferiche del getto il combustibile a contatto con l'aria presente nel cilindro ad elevata temperatura e pressione inizia ad evaporare, formando così una zona in cui la miscela aria-combustibile è omogenea.

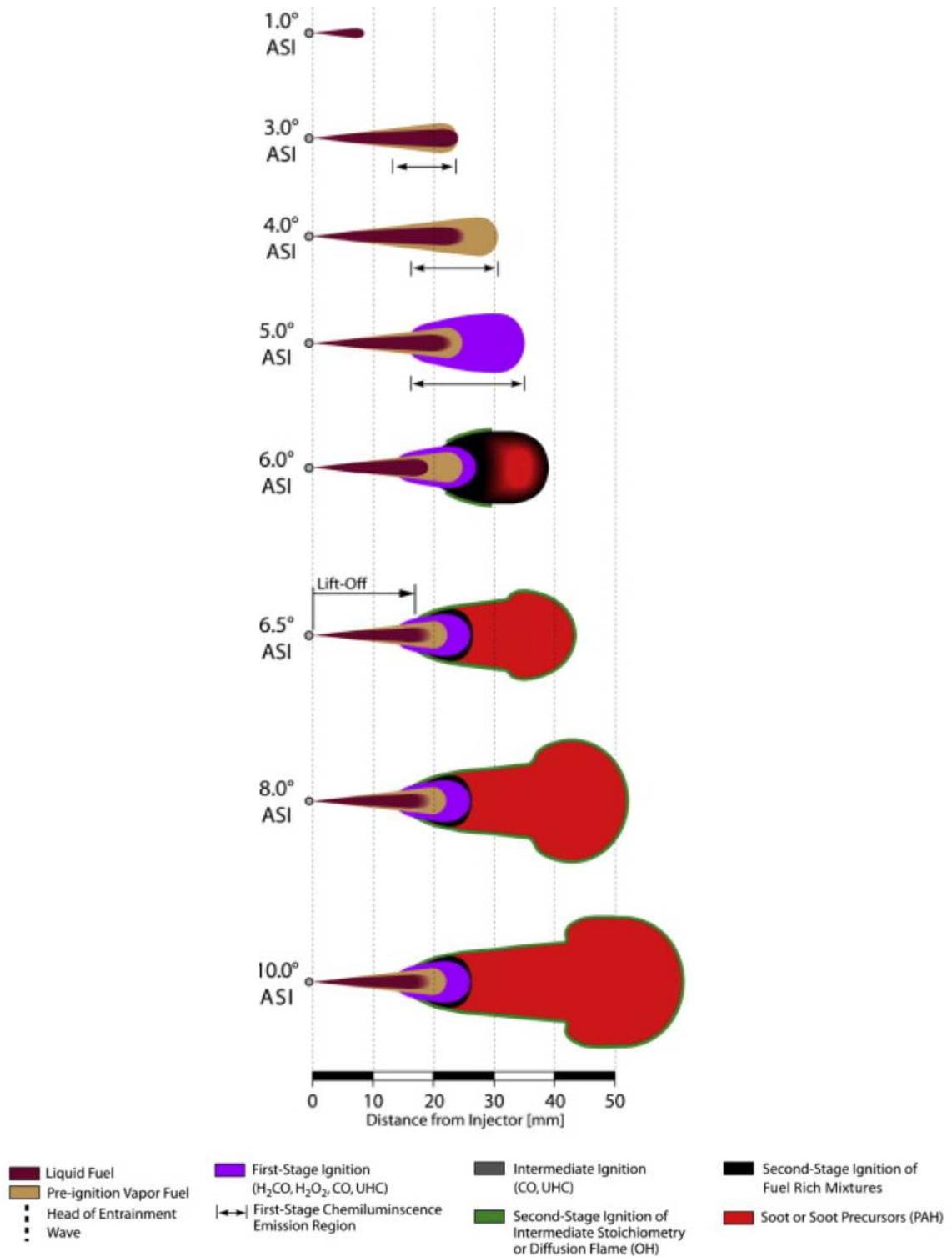


Figura 1.5: Evoluzione del processo di combustione in una fiamma Diesel, [15].

I vapori di combustibile e l'ossidante iniziano a reagire proprio in questa zona, attraverso reazione a bassa temperatura dando luogo a una fiamma fredda. Attraverso high-speed schlieren imaging è possibile rilevare efficacemente la zona di fiamma fredda a causa della riduzione dell'indice di rifrazione della fase vapore in seguito all'aumento di temperatura: in figura 1.6 la zona di fiamma fredda, evidenziata in bianco, si trova nella zona periferica in testa alla penetrazione dei vapori di combustibile.

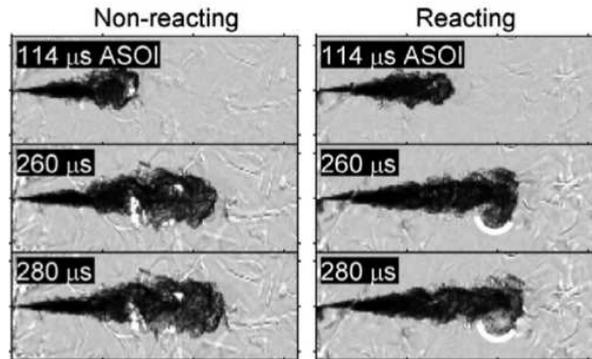


Figura 1.6: Evoluzione del processo di fiamma fredda, [3].

I radicali prodotti in questa prima fase e l'energia rilasciata portano all'accensione della carica premiscelata. La curva di rilascio del calore (in figura 1.4) ha un picco molto elevato in questa fase, dovuto sostanzialmente alla rapidità con cui si propagano le fiamme premiscelate.

A seguito del picco di rilascio di calore, la fiamma migra progressivamente verso il regime diffusivo: le gocce di combustibile del core dello spray evaporano a causa del calore liberato negli strati più periferici, formando così una miscela in grado di reagire.

Dopo il transitorio iniziale la fiamma si stabilizza a una certa distanza dall'iniettore (Lift-Off Length) ed entra in regime quasi-stazionario: da questo momento fino alla fine dell'iniezione non si hanno più sostanziali variazioni della struttura di fiamma.

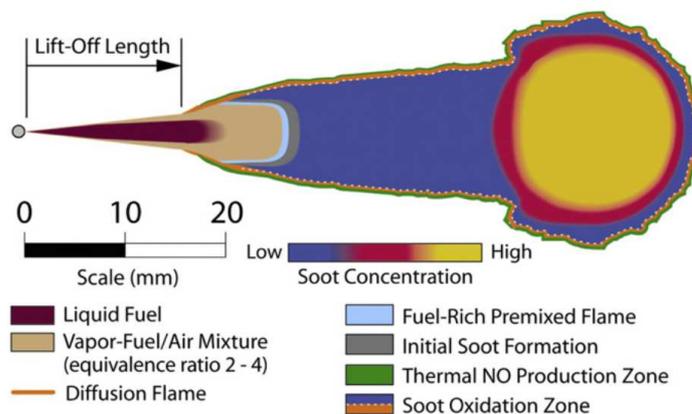


Figura 1.7: Fiamma quasi-stazione in regime mixing-controlled, [15].

Per ulteriori informazioni si rimanda a [5] e [15].

1.3 Equazioni di trasporto per flussi reagenti

Dopo aver parlato dei modelli concettuali di combustione nei motori Diesel è necessario definire il set di equazioni necessarie per studiare l'intero processo. In fluidodinamica si è soliti fare uso di equazioni differenziali di trasporto, che discretizzate rappresentano le equazioni fondamentali risolte dai codici CFD. Le equazioni necessarie per descrivere un sistema reagente multifase multicomponente sono:

- equazione di continuità
- equazione di conservazione della massa per le specie chimiche
- equazione di conservazione della quantità di moto
- equazione di conservazione dell'energia

alle quali va aggiunta un'equazione di stato per ogni specie chimica presente.

1.3.1 Equazione di continuità

Con equazione di continuità si indica l'equazione di conservazione della massa. Scritta in forma compatta per la sola fase gassosa, risulta essere

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = \rho \dot{S} \quad (1.1)$$

dove \dot{S} è il termine sorgente legato all'evaporazione dello spray di combustibile.

1.3.2 Equazione di trasporto delle specie chimiche

Affianco all'equazione di continuità, è necessario scrivere le equazioni di conservazione della massa per ogni specie chimica presente nel dominio. Includendo solo i termini più rilevanti, non tenendo cioè conto di termini secondari come quelli legati alla diffusione di Soret, la legge di conservazione può essere scritta come:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} Y_i) = \vec{\nabla} \cdot (\rho D_i \vec{\nabla} Y_i) + \rho \dot{S}_i + \dot{\omega}_i \quad (1.2)$$

dove si possono riconoscere, in ordine, il termine di variazione temporale, quello di trasporto convettivo, il termine di trasporto diffusivo e due termini sorgente, il primo tiene conto dell'evaporazione dello spray di combustibile, il secondo invece rappresenta il tasso di generazione/distruzione dovuto alle reazioni chimiche.

1.3.3 Equazione di trasporto della quantità di moto

Per descrivere l'interazione delle forze agenti sul sistema, è necessario scrivere tre equazioni di bilancio, una per ogni componente della velocità. L'equazione, nota come equazione di

Navier-Stokes, può essere scritta in forma compatta come:

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\vec{\nabla} p + \vec{\nabla} \cdot \underline{\underline{\tau}} + \rho \vec{g} + \vec{f}_s \quad (1.3)$$

dove, affianco al termine tempo-variante, il termine di trasporto convettivo, il termine legato alla pressione, il termine diffusivo legato agli sforzi viscosi e quello legato alle forze di volume, appare un ulteriore componente legata all'interazione della fase gassosa con lo spray liquido. Per quanto riguarda il termine di trasporto diffusivo viscoso, assumendo il comportamento Newtoniano del fluido, può essere riscritto come:

$$\underline{\underline{\tau}} = \mu \left[(\vec{\nabla} \vec{u}) + (\vec{\nabla} \vec{u})^T - \frac{2}{3} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) \underline{\underline{I}} \right] \quad (1.4)$$

dove μ è la viscosità dinamica e $\underline{\underline{I}}$ è il tensore unità.

1.3.4 Equazione di trasporto dell'energia

Tra le varie forme in cui può essere scritta l'equazione di trasporto dell'energia si adotta la formulazione basata sul trasporto dell'entalpia. Definendo quindi

$$h = \sum_{i=1}^{NS} Y_i \left(\Delta h_{f,i}^0 + \int_{T_0}^T c_{p_i} dT \right) \quad (1.5)$$

è possibile scrivere l'equazione di conservazione dell'energia, che in forma compatta risulta essere:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} h) = \frac{Dp}{Dt} - \vec{\nabla} \cdot \vec{J} + \dot{Q}^s - \dot{Q}^r \quad (1.6)$$

dove \dot{Q}^s rappresenta lo scambio termico dovuto alla presenza di uno spray liquido mentre \dot{Q}^r tiene conto dei flussi radiativi. Per quanto riguarda il termine $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}$ può essere utile considerare che

$$\vec{J} = -\lambda \vec{\nabla} T + \sum_{i=1}^{NS} \vec{J}_i h_i \quad (1.7)$$

rivelando così la doppia natura di questo termine: esso infatti è la somma del flusso conduttivo e di quello legato alla diffusione delle specie chimiche.

1.3.5 Medie alle Reynolds e medie alle Favre

La descrizione dei flussi turbolenti è tutt'ora una delle sfide più provanti per l'analisi CFD. La natura casuale e l'ampio range delle scale di lunghezza dei flussi turbolenti non permette l'utilizzo di procedure computazionalmente economiche per tracciare il moto di tutte le particelle di fluido.

La turbolenza infatti genera nel flusso vortici con ampi range di scale di lunghezza e di tempo che interagiscono dinamicamente tra loro: ciò comporta che il campionamento, o detto in altre parole le mesh e l'intervallo temporale di discretizzazione, debba necessaria-

mente essere fatto con frequenza e dettaglio dimensionale minore di quello dei micro-vortici presenti nel dominio: questo è l'approccio seguito dalla DNS (Direct Numerical Simulation), con la quale si risolvono direttamente tutte le scale dei vortici, fino ad arrivare alla scala di Kolmogorov, nella quale avviene la conversione dell'energia cinetica turbolenta in calore. Come ci si può aspettare, la DNS garantisce risultati dettagliati e rigorosi, a spesa però di oneri computazionali insostenibili.

Per ridurre i tempi di calcolo, si possono allora utilizzare metodi che risolvano direttamente la scala dei vortici con lunghezza maggiore, modellando poi il resto delle scale: questo approccio è tipico della LES (Large Eddy Simulation). La richiesta di potenza di calcolo e l'onere computazionale sono ridotti rispetto al caso di simulazioni DNS, ma ancora ingestibili in ambito industriale, soprattutto nel caso di geometrie e flussi complessi.

Per ridurre ulteriormente l'onere computazionale è quindi necessario risolvere unicamente il flusso medio, mediando temporalmente le equazioni di trasporto, separando il comportamento medio da quello fluttuante. Gli effetti della turbolenza, rilevabili dalla presenza di extra termini nelle equazione mediate dovuti alle fluttuazioni, sono risolti attraverso i modelli di turbolenza. Questo approccio è alla base della RANS (Reynolds-Average Navier-Stokes), l'approccio più diffuso a livello industriale.

Per flussi incompruibili si fa ricorso alle medie alla Reynolds, secondo cui

$$f = \bar{f} + f' \quad (1.8)$$

$$\bar{f} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} f dt \quad (1.9)$$

$$\bar{f'} = 0 \quad (1.10)$$

scomponendo così il termine medio da quello fluttuante.

Per flussi comprimibili si fa uso invece di medie pesante anche sulla massa, dette medie alla Favre, secondo cui

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (1.11)$$

$$\tilde{f} = \frac{\rho f}{\bar{\rho}} \quad (1.12)$$

$$\tilde{f''} = 0 \quad (1.13)$$

attraverso le quali si possono riscrivere le equazioni di trasporto per flussi comprimibili secondo l'approccio RANS, che risultano essere:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \vec{u}) = \bar{\rho} \dot{S} \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \vec{u} \tilde{Y}_i) = \vec{\nabla} \cdot (\overline{\rho D_i \vec{\nabla} Y_i}) + \bar{\rho} \tilde{S}_i + \tilde{\omega}_i - \vec{\nabla} \cdot (\overline{\rho \vec{u}'' Y_i''}) \quad (1.15)$$

$$\frac{\partial \widetilde{\rho \vec{u}}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\widetilde{\rho \vec{u} \vec{u}}) = -\vec{\nabla} \widetilde{p} + \vec{\nabla} \cdot \widetilde{\underline{\underline{\tau}}} + \widetilde{\rho \vec{g}} + \widetilde{\vec{f}}_s - \vec{\nabla} \cdot (\widetilde{\rho \vec{u}'' \vec{u}''}) \quad (1.16)$$

$$\frac{\partial \widetilde{\rho h}}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\widetilde{\rho \vec{u} h}) = \frac{D \widetilde{p}}{Dt} - \vec{\nabla} \cdot \widetilde{\vec{J}} + \widetilde{\vec{Q}}^s - \widetilde{\vec{Q}}^r - \vec{\nabla} \cdot (\widetilde{\rho \vec{u}'' h''}) \quad (1.17)$$

che contengono termini aggiuntivi legati alle componenti fluttuanti, i quali possono essere interpretati come dei flussi turbolenti: la turbolenza infatti implica un incremento dei coefficienti di scambio di massa, quantità di moto ed energia.

1.3.6 Modelli di turbolenza

I termini turbolenti che compaiono nelle equazioni di trasporto mediate devono essere adeguatamente modellati per poter chiudere le equazioni di trasporto. In letteratura sono presenti numerosi modelli di chiusura per le equazioni RANS, che possono però essere suddivisi in due macro famiglie:

- stress transport models
- eddy viscosity models

le quali si basano su ipotesi e considerazioni drasticamente differenti.

I modelli di turbolenza che appartengono alla famiglia degli stress transport models, tra le cui fila ci sono il modello RSM (Reynolds Stress Model) e quello ASM (Algebraic Stress Model), si basano sull'idea di scrivere e risolvere le equazioni di trasporto, siano esse differenziali (RSM) o algebriche (ASM), in modo da poter descrivere efficacemente l'anisotropia tipica dei fenomeni turbolenti. Questi modelli risultano particolarmente dispendiosi in termini di onere computazionale e instabili alle volte, lasciando così spazio, qual'ora non sia necessaria un'analisi estremamente dettagliata, ai meno onerosi e più robusti modelli eddy viscosity.

I modelli appartenenti a questa famiglia, tra le cui fila sono presenti il modello Spalart-Allmaras, il modello $k - \varepsilon$ e il modello $k - \omega$, si basano sul concetto di viscosità turbolenta (eddy viscosity) e sulle ipotesi di Boussinesq, secondo le quali i termini turbolenti possono essere valutati a partire dalle grandezze medie con l'ausilio di equazioni di trasporto per un limitato numero di particolari grandezze turbolente (ν_t , k , ε e ω). Seguendo questo approccio si possono quindi riscrivere i termini formati dai prodotti delle fluttuazioni:

$$-\widetilde{\rho u_j'' u_i''} = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u_j''}}{\partial x_i} + \frac{\partial \widetilde{u_i''}}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u_k''}}{\partial x_k} \right) + \frac{2}{3} \widetilde{\rho k} \quad (1.18)$$

$$-\widetilde{\rho u_i'' Y_k''} = \frac{\mu_t}{Sc_{t,k}} \frac{\partial \widetilde{Y_k}}{\partial x_i} \quad (1.19)$$

$$-\widetilde{\rho u_i'' h''} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \widetilde{h}}{\partial x_i} \quad (1.20)$$

dove δ_{ij} è la delta di Kronecker, k è l'energia cinetica turbolenta, definita come

$$k = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} \widetilde{u_i'' u_i''} \quad (1.21)$$

e μ_t è la viscosità dinamica turbolenta, definita in maniera differente a seconda del modello utilizzato. Pr_t e $Sc_{t,k}$ sono invece il numero di Prandtl turbolento e il numero di Schimidt turbolento della specie k-esima, definiti rispettivamente come

$$Pr_t = \frac{\nu_t}{\alpha_t} \quad (1.22)$$

$$Sc_{t,k} = \frac{\nu_t}{D_{t_k}} \quad (1.23)$$

il primo assunto tipicamente pari a 0.85, mentre il secondo, vista la forte dipendenza delle caratteristiche del campo di moto, varia tra 0.2 e 1.5 a seconda delle applicazioni.

Rimane ora da analizzare in dettaglio μ_t : come detto, la sua definizione varia in base al modello di turbolenza adottato. Per la modellazione di flussi turbolenti con presenza di spray si utilizza generalmente il modello $k - \varepsilon$ standard: questo modello a due equazioni definisce μ_t come

$$\mu_t = \bar{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (1.24)$$

con l'energia cinetica turbolenta k e il tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ε calcolati attraverso la risoluzione di due equazioni di trasporto

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] - \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_i''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho} \varepsilon \quad (1.25)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \varepsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] - C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \bar{\rho} \widetilde{u_j'' u_i''} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (1.26)$$

che contengono cinque costanti di aggiustamento, di cui in tabella 1.1 sono riportati i valori tipici.

C_μ	σ_k	σ_ε	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$
0.09	1.00	1.30	1.44	1.92

Tabella 1.1: Costanti di aggiustamento per il modello $k - \varepsilon$ standard.

Nel caso di flussi turbolenti con presenza di spray, il valore di $C_{\varepsilon 1}$ è tipicamente imposto pari a 1.55 per tener conto dell'interazione tra spray e turbolenza.

1.4 Modelli di combustione nei motori Diesel

Seguendo l'approccio proposto in numerosi articoli, i modelli di combustione per motori Diesel sono principalmente il Characteristic Time-scale Combustion model (CTC), il well-mixed model con integrazione diretta e il Representative Interactive Flamelet model (RIF): i primi due vengono ora brevemente descritti, mentre il RIF model sarà presentato nel dettaglio nel prossimo capitolo.

1.4.1 Characteristic Time-scale Combustion model

Il modello CTC, proposto da Abrahm e adattato alla combustione nei motori Diesel da Kong e Reitz, si divide in due parti: per lo studio della fase a bassa temperatura ed autoaccensione si fa uso del così detto Shell model, mentre la fase ad alta temperatura è risolta attraverso le composizioni attuali e all'equilibrio di ogni specie e la scala caratteristica del tempo (characteristic time scale). Per una descrizione più accurata si rimanda a [10] e [11].

Lo Shell model utilizza schemi cinetici ridotti formati da cinque generiche specie chimiche e da otto generiche reazioni che permettono di descrivere le fasi fondamentali delle reazioni a catena, come visualizzato in figura 1.8.

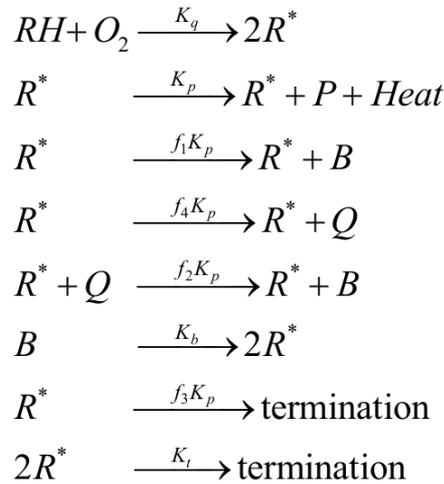


Figura 1.8: Generiche reazioni dello Shell model, [10].

Come detto, lo Shell model è utilizzato solo nella fase di ignizione: raggiunta una temperatura di soglia si passa al CTC model per simulare le reazioni di alta temperatura. Con questo modello di combustione, la velocità di reazione e di conversione delle specie chimiche è calcolata sulla base del valore della frazione massica di ogni specie all'equilibrio e del tempo caratteristico τ_c necessario per raggiungere l'equilibrio, arrivando a scrivere che

$$\frac{dY_m}{dt} = -\frac{Y_m - Y_m^*}{\tau_c} \quad (1.27)$$

dove Y_m è la frazione massica della specie m e Y_m^* è la frazione massica calcolata all'equilibrio.

Il tempo caratteristico τ_c è definito come

$$\tau_c = \tau_l + f\tau_t \quad (1.28)$$

dove con τ_l è indicata la scala temporale laminare, τ_t la scala temporale turbolenta mentre f è un coefficiente che descrive l'influenza della turbolenza sul processo di combustione.

La scala temporale τ_l è ricavata a partire dalla reazione one-step tra combustibile ed ossidante utilizzando la classica equazione di Arrhenius:

$$\tau_l = \frac{1}{A} [fuel]^{0.75} [O_2]^{-1.5} \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right) \quad (1.29)$$

dove A è una costante di aggiustamento da valutare a partire da dati sperimentali, E_a è l'energia di attivazione e R è la costante universale dei gas.

La scala temporale τ_t è ricavata a partire dalle grandezze turbolente k ed ε attraverso l'equazione

$$\tau_t = C_{m2} \frac{k}{\varepsilon} \quad (1.30)$$

dove C_{m2} è una costante di aggiustamento tipicamente imposta pari a 0.142.

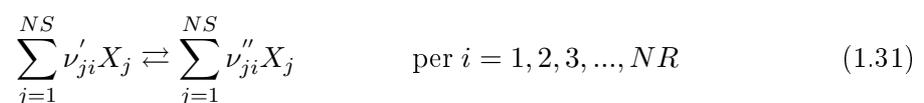
La semplicità dei modelli Shell/CTC permette di limitare l'onere computazionale mantenendo allo stesso tempo una soddisfacente accuratezza nei risultati globali, come ad esempio la curva di pressione o di rilascio del calore, utili per studi parametrici di motori Diesel.

I risultati scadono pesantemente entrando in regimi di fiamma a bassa temperatura e premiscelati (LTC), riducendo così il campo di applicabilità di questo modello, e nel caso in cui siano necessarie stime accurate dei prodotti di parziale ossidazione (*UHC* e *CO*).

1.4.2 Well-mixed model con integrazione diretta

A differenza del CTC model, il well-mixed model risolve le equazioni di trasporto integrando direttamente i termini sorgente derivanti dalle reazioni chimiche ricavati attraverso l'utilizzo di schemi cinetici dettagliati.

Considerando la generica reazione chimica elementare



dove ν'_{ij} e ν''_{ij} sono i coefficienti stechiometrici della specie j -esima nella reazione i -esima rispettivamente dei reagenti e dei prodotti, il tasso di produzione/distruzione volumetrico della generica specie chimica può essere calcolato risolvendo il sistema di equazioni

differenziali

$$r_j = \frac{d[X_j]}{dt} = \sum_{i=1}^{NR} (\nu_{ji}'' - \nu_{ji}') \left(k_f \prod_{j=1}^{NS} [X_j]^{\nu_{ji}'} - k_b \prod_{j=1}^{NS} [X_j]^{\nu_{ji}''} \right) \quad (1.32)$$

dove $[X_j]$ è la concentrazione molare della specie j-esima e k_f e k_b sono il tasso delle reazioni in avanti (forward) e all'indietro (backward), funzioni della temperatura secondo l'equazione di Arrhenius

$$k = AT^b \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (1.33)$$

dove A è il fattore pre-esponenziale, b è il fattore di dipendenza dalla temperatura, E_a è l'energia di attivazione ed R è la costante universale dei gas.

Nel well-mixed model ogni cella del dominio CFD è trattata come un sistema chiuso avente composizione uniforme in tutto il volumetto: grazie a questa ipotesi è possibile scrivere le equazioni di conservazione delle specie chimiche e dell'energia per ogni cella

$$\frac{dY_j}{dt} = \frac{r_j W_j}{\rho} \quad (1.34)$$

$$c_v \frac{dT}{dt} + \frac{1}{\rho} \sum_{j=1}^{NS} e_j r_j W_j = 0 \quad (1.35)$$

dove c_v è il calore specifico a volume costante, e_j è l'energia interna della specie j-esima e W_j è la massa molecolare della specie j-esima.

Per ulteriori informazioni si rimanda a [10] e [12].

Capitolo 2

Il modello RIF

In questo capitolo si vuole presentare il modello RIF (Representative Interactive Flamelet): alla base di questo modello, proposto da Pitsch e Peters, vi è il concetto di separazione del dominio chimico da quello fisico, il quale implica quello di conserved scalar e di scalar dissipation rate. Si procede quindi con l'introduzione di questi principi, per poi descrivere il modello RIF.

2.1 Laminar flamelet concept

I complessi fenomeni che intervengono durante il processo di combustione in motore Diesel possono essere modellati facendo uso del laminar flamelet concept, proposto da Peters in [17]. Alla base di questo concetto vi è l'intuizione che anche i fronti di fiamma turbolenti sono localmente dei fronti piani, e che quindi possono essere studiati attraverso modelli monodimensionali avendo variazioni principalmente lungo una sola direttrice: il problema è del tutto analogo a un problema agli autovalori, e l'asse principale, o autovettore, lungo la quale si hanno variazioni di composizione è la direzione definita dal gradiente della mixture fraction Z .

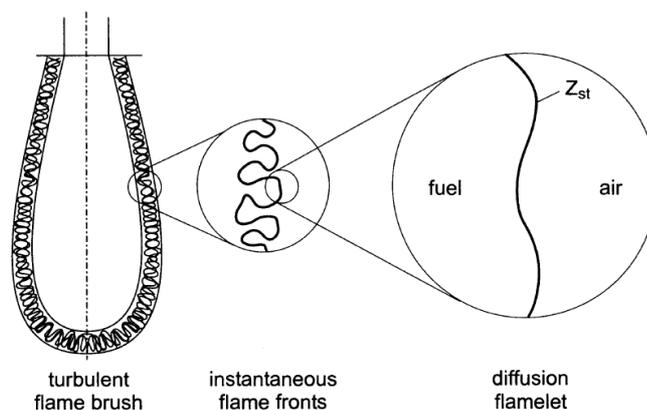


Figura 2.1: Schema illustrativo del laminar flamelet concept, [4].

Questo approccio comporta l'utilizzo di due domini: il primo è quello fisico, nel quale si risolve unitamente alle classiche equazioni del trasporto anche quelle della mixture fraction, mentre il secondo è il dominio chimico, dove si risolvono le equazioni di governo dei flamelet.

2.1.1 Mixture fraction

In una fiamma non-premiscelata il combustibile e l'ossidante vengono alimentati separatamente in camera di combustione per poi miscelarsi per effetto del campo di moto. Il livello di miscelazione combustibile-ossidante è descritto attraverso l'introduzione del conserved scalar mixture fraction Z . La mixture fraction non varia con l'avanzamento delle reazioni, ma dipende unicamente dai contributi di trasporto di massa diffusivi ed advettivi. Si presentano ora i passaggi principali per arrivare a scrivere le equazioni di trasporto per la mixture fraction, ripresi da [18].

Considerando una generica reazione semplificata del tipo



dove con F è indicato il combustibile, con O l'ossidante e con P i prodotti di combustione, è possibile derivare le equazioni di trasporto per la mixture fraction. Introducendo le ipotesi di:

- pressione costante e numero di Mach basso
- stesso coefficiente di diffusione D_i per ogni specie chimica
- stesso calore specifico c_{p_i} per ogni specie chimica

è possibile riscrivere le equazioni di trasporto dell'energia, della massa di combustibile e ossidante, che assumono la seguente forma

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_F}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_F}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_F \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho Y_O}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_O}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_O}{\partial x_i} \right) + s \dot{\omega}_F \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i T}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y_F}{\partial x_i} \right) + \frac{Q}{c_p} \dot{\omega}_F \quad (2.4)$$

dove $\dot{\omega}_F$ è il tasso di reazione del combustibile, s è il rapporto massico stechiometrico ossidante-combustibile

$$s = \frac{\nu_O W_O}{\nu_F W_F} \quad (2.5)$$

e Q è il calore rilasciato per unità di massa di combustibile.

Combinando le tre equazioni di trasporto appena scritte, e assumendo che il numero di Lewis

$$Le = \frac{\alpha}{D} = \frac{\lambda}{\rho c_p D} = 1 \quad (2.6)$$

compaiono tre conserved scalar

$$z_1 = sY_F - Y_O \quad (2.7)$$

$$z_2 = \frac{c_p T}{Q} + Y_F \quad (2.8)$$

$$z_3 = s \frac{c_p T}{Q} + Y_O \quad (2.9)$$

che seguono la stessa equazione di trasporto diffusiva-avvettiva

$$\frac{\partial \rho z_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i z_j}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial z_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.10)$$

con $j = 1, 2, 3$. Questi tre conserved scalar hanno però condizioni al contorno differenti: è quindi utile normalizzarli in modo da ottenere variabili che abbiano come condizioni al contorno pari a 1 dal lato del flusso di combustibile e 0 dal lato del flusso di ossidante. Si definiscono quindi gli scalari Z_j come

$$Z_j = \frac{z_j - z_j^O}{z_j^F - z_j^O} \quad (2.11)$$

i quali, avendo le medesime condizioni al contorno e rispondendo ad un'unica equazione di trasporto, sono coincidenti e danno luogo alla così detta mixture fraction Z , la cui equazione di trasporto risulta essere

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Z}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{S} \quad (2.12)$$

dove D_Z è la diffusività della mixture fraction mentre $\rho \dot{S}$ è il termine sorgente associato all'evaporazione dello spray di combustibile.

Seguendo l'approccio presentato nel capitolo precedente, mediando alla Favre l'equazione di trasporto per la mixture fraction si arriva a scrivere la seguente equazione mediata

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Z}}{\partial x_i} = \bar{\rho} \tilde{S} - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{Z}''}{\partial x_i} \quad (2.13)$$

nel quale compare la media del prodotto delle fluttuazioni, esattamente come nelle classiche equazione di trasporto mediate.

L'equazione di trasporto per la mixture fraction implica l'introduzione di un'ulteriore equazione di trasporto per la varianza della mixture fraction $\widetilde{Z''^2}$, definita come

$$\widetilde{Z''^2} = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} (Z'')^2 dt \quad (2.14)$$

e risulta essere

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \widetilde{\rho Z''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u_i Z''^2}}{\partial x_i} = & - \frac{\partial \widetilde{\rho u_i'' Z''^2}}{\partial x_i} + \\
& - 2 \left(\widetilde{\rho u_i'' Z''} \right) \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_i} + \\
& - 2 \widetilde{\rho} D_Z \left(\frac{\partial \widetilde{Z''}}{\partial x_i} \right)^2 + \\
& + 2 \left(1 - \widetilde{Z} \right) \widetilde{\rho Z''} \dot{\widetilde{S}} - \widetilde{\rho Z''^2} \dot{\widetilde{S}}
\end{aligned} \tag{2.15}$$

dove si riconoscono, in ordine, il termine tempo-variante, quello legato al trasporto advettivo, il termine di trasporto turbolento, quello di produzione, quello di dissipazione e infine il termine sorgente ancora una volta legato all'evaporazione dello spray di combustibile.

Come visto nel capitolo precedente, è necessario a questo punto introdurre delle equazioni di chiusura per modellare i termini incogniti (trasporto turbolento, termine dissipativo e sorgente), che portano alle seguenti equazioni di trasporto

$$\frac{\partial \widetilde{\rho Z}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u_i Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,\widetilde{Z}}} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_i} \right) + \widetilde{\rho} \dot{\widetilde{S}} \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \widetilde{\rho Z''^2}}{\partial t} + \frac{\partial \widetilde{\rho u_i Z''^2}}{\partial x_i} = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{Sc_{t,\widetilde{Z''^2}}} \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial x_i} \right) + \\
& + 2 \frac{\mu_t}{Sc_{t,\widetilde{Z}}} \left(\frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2 + \\
& - \widetilde{\rho} \widetilde{\chi} + \\
& + 2 \left(1 - \widetilde{Z} \right) \widetilde{\rho Z''} \dot{\widetilde{S}} - \widetilde{\rho Z''^2} \dot{\widetilde{S}}
\end{aligned} \tag{2.17}$$

nelle quali compaiono tre nuovi termini: $Sc_{t,\widetilde{Z}}$ e $Sc_{t,\widetilde{Z''^2}}$ sono i numeri di Schmidt turbolenti di \widetilde{Z} e $\widetilde{Z''^2}$, i quali sono posti pari a 0.9 in accordo con [8], mentre $\widetilde{\chi}$ è la media dello scalar dissipation rate, il cui valore istantaneo è definito

$$\chi = 2D_Z \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)^2 \tag{2.18}$$

mentre il valore mediato risulta essere

$$\widetilde{\chi} = 2D_Z \left(\frac{\partial \widetilde{Z''}}{\partial x_i} \right)^2 \tag{2.19}$$

che, in analogia con il tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ε , misura la velocità con cui decadono le fluttuazioni della mixture fraction.

2.1.2 Laminar flamelet equations

L'introduzione della mixture fraction Z permette di ridurre il numero di variabili indipendenti che influenzano il sistema, e in particolare la temperatura e la composizione chimica: inizialmente infatti esse erano funzione sia del tempo che della posizione spaziale, mentre introducendo la trasformazione nel dominio Z esse sono funzione unicamente del tempo e della mixture fraction.

$$Y_i = Y_i(\vec{x}, t) \implies Y_i = Y_i(Z, t) \quad (2.20)$$

$$T = T(\vec{x}, t) \implies T = T(Z, t) \quad (2.21)$$

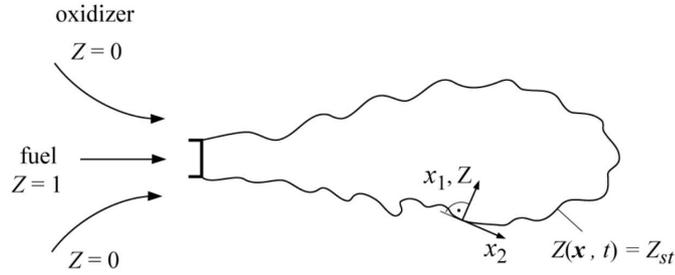


Figura 2.2: Trasformazione del dominio fisico al dominio chimico, [16].

Come si può vedere in figura 2.2, a rigore la trasformazione nel dominio chimico, che ha per assi il gradiente di Z e l'asse normale e binormale ad esso, non comporta nessuna riduzione delle dimensioni del problema: ipotizzando però che il fronte di fiamma, localizzato nella zona in cui si forma una miscela stechiometrica, sia estremamente sottile, confrontato con le dimensioni delle strutture del flusso medio e con il corrugamento del fronte di fiamma turbolento, i gradienti lungo l'asse normale e binormale al gradiente della mixture fraction possono essere trascurati. La struttura di fiamma risulta quindi funzione solo del tempo e della mixture fraction, con una struttura localmente monodimensionale.

A questo punto è possibile trasformare le equazioni di conservazione delle specie chimiche e dell'energia nel nuovo dominio chimico, le quali, come suggerito in [8], risultano essere

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \dot{\omega}_i \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial T}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \rho \frac{\chi}{2c_p} \frac{\partial T}{\partial Z} \frac{\partial c_p}{\partial Z} - \sum_{i=1}^{NS} \rho \frac{\chi}{2Le_i} \frac{c_{p_i}}{c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \\ + \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^{NS} \dot{\omega}_i h_i - \frac{1}{c_p} \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\dot{q}_r}{c_p} = 0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

nelle quali compaiono il calore specifico della specie i -esima c_{p_i} , il calore specifico della miscela c_p , il tasso di produzione della specie i -esima $\dot{\omega}_i$ (espresso in $[\frac{kg}{m^3s}]$), l'entalpia termochimica della specie i -esima h_i , il calore scambiato per irraggiamento \dot{q}_r e il numero di Lewis della specie i -esima Le_i , supposti unitari seguendo le indicazioni di [16].

Dalle equazioni appena scritte si può notare che è assente il termine di trasporto convettivo nel spazio della mixture fraction: non esiste infatti alcun trasporto convettivo relativo tra gli scalari essendo trasportati con la medesima velocità nel dominio fisico.

L'accoppiamento tra dominio fisico e dominio chimico avviene attraverso la pressione e lo scalar dissipation rate, i quali vengono valutati nel dominio fisico per poi essere utilizzati per risolvere le equazioni di governo del flamelet.

Per ulteriori informazioni si rimanda a [18] e [8].

2.1.3 Scalar dissipation rate

Vista la posizione cruciale dello scalar dissipation rate all'interno del RIF model, si ritiene necessario aggiungere ulteriori dettagli.

Lo scalar dissipation rate ha le dimensioni di un inverso di un tempo $[\frac{1}{s}]$, e, come si può vedere nelle equazioni di trasporto nel dominio Z , svolge un ruolo analogo ad una diffusività, riflettendo così la stretta interazione tra chimica e turbolenza (turbulence/chemistry interaction).

Peters in [16] suggerisce un'equazione di chiusura per χ , valutata studiando il caso di un bruciatore in regime laminare controcorrente stazionario e con densità e coefficiente di diffusione costante (figura 2.3), che risulta essere

$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp \left\{ -2 [\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2 \right\} \quad (2.24)$$

dove erfc^{-1} è la funzione inversa della funzione degli errori complementare mentre a_s è uno strain term coefficient, che tiene conto anche della configurazione della fiamma.

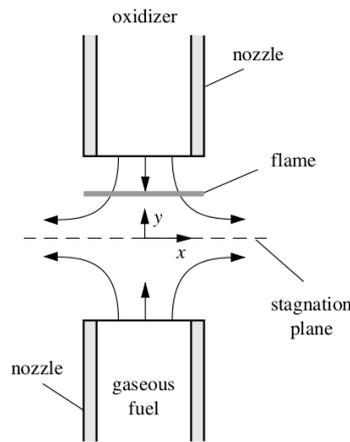


Figura 2.3: Illustrazione schematica di un bruciatore controcorrente, [16].

Manca ora da definire un'equazione di chiusura per $\tilde{\chi}$ che compare nell'equazione di trasporto di $\widetilde{Z''^2}$: in [16] viene ricavata a partire dall'integral time scale τ_L

$$\tau_L = \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.25)$$

definendo la scala τ_Z come

$$\tau_Z = \frac{\widetilde{Z''^2}}{\widetilde{\chi}} \quad (2.26)$$

e introducendo il rapporto tra le due scale temporali c_χ

$$c_\chi = \frac{\tau_L}{\tau_Z} \quad (2.27)$$

che è posto tipicamente pari a 2. Lo scalar dissipation rate può essere quindi calcolato come

$$\widetilde{\chi} = c_\chi \frac{\widetilde{\varepsilon}}{k} \widetilde{Z''^2} \quad (2.28)$$

permettendo così la risoluzione dell'equazione di trasporto di $\widetilde{Z''^2}$ nel dominio fisico.

2.2 Representative Interactive Flamelet model

Il Representative Interactive Flamelet model è un modello di combustione che accoppia la soluzione dell'equazioni del trasporto nel dominio flamelet con la soluzione delle equazioni RANS nel dominio CFD.

L'interazione tra la soluzione del dominio chimico del flamelet e il dominio fisico CFD è schematizzato in figura 2.4.

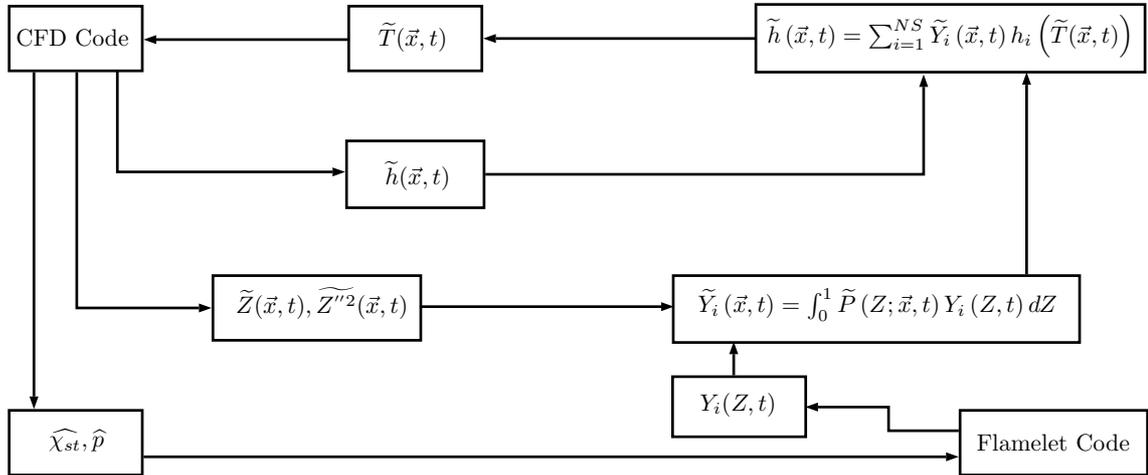


Figura 2.4: Struttura del Representative Interactive Flamelet model.

Nel dominio CFD si risolvono le equazioni per il campo di moto, per l'entalpia, la turbolenza, la mixture fraction e la sua varianza. In seguito si risolvono le equazioni nel dominio flamelet, che richiedono in input la media nel dominio CFD dello scalar dissipation rate condizionato sul valore stechiometrico e della pressione. Il dissaccoppiamento tra dominio chimico e fisico permette di integrare le equazioni di trasporto con differenti time step, in modo da avere maggior risoluzione temporale nella soluzione delle reazioni chimiche che sono per loro natura stiff.

Una volta risolte le equazioni del flamelet, la distribuzione delle frazioni massiche e il campo di temperatura nel dominio CFD vengono calcolati a partire dalle soluzioni del dominio chimico utilizzando delle particolari Probability Density Function, funzioni della mixture fraction e della sua varianza.

2.2.1 Parametri per la soluzione delle equazioni nel dominio flamelet

La soluzione delle equazioni nel dominio flamelet richiede il profilo di $\chi = \chi(Z)$: nel paragrafo precedente si era riportata l'equazione di chiusura proposta da Pitsch

$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\} \quad (2.29)$$

la quale non può essere utilizzata direttamente in quanto non è noto a priori il valore di a_s .

La distribuzione va quindi ricavata a partire da $\tilde{\chi}$ calcolato nel dominio CFD, che si ricorda essere definito come

$$\tilde{\chi}(\vec{x}, t) = 2D_Z \left(\widetilde{\frac{\partial Z''}{\partial x_i}} \right)^2 \quad (2.30)$$

e calcolato attraverso l'equazione

$$\tilde{\chi}(\vec{x}, t) = c_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \widetilde{Z''^2} \quad (2.31)$$

dal quale si ricava il valore del conditional scalar dissipation rate at stoichiometric mixture $\widetilde{\chi}_{st}$, calcolato attraverso la formula di Hellstrom

$$\widetilde{\chi}_{st}(\vec{x}, t) = \frac{\tilde{\chi}}{\int_0^1 \frac{f(Z)}{f(Z_{st})} \tilde{P}(Z) dZ} \quad (2.32)$$

dove $f(Z)$ è la funzione esponenziale

$$f(Z) = \exp \left\{ -2 \left[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z) \right]^2 \right\} \quad (2.33)$$

$f(Z_{st})$ è il valore della funzione esponenziale calcolata per Z stechiometrico mentre $\tilde{P}(Z)$ è la funzione densità di probabilità (Probability Density Function) di cui ci parlerà diffusamente più tardi.

Ricavata la distribuzione di $\widetilde{\chi}_{st}$ se ne calcola la media nel dominio CFD

$$\widehat{\chi}_{st}(t) = \frac{\int_V \widetilde{\chi}_{st}^{3/2} \tilde{\rho} \tilde{P}(Z_{st}) dV}{\int_V \widetilde{\chi}_{st}^{1/2} \tilde{\rho} \tilde{P}(Z_{st}) dV} \quad (2.34)$$

che viene utilizzata per il calcolo della distribuzione di χ

$$\chi(Z, t) = \widehat{\chi}_{st} \frac{f(Z)}{f(Z_{st})} \quad (2.35)$$

la quale viene imposta per la risoluzione delle equazione di trasporto nel dominio flamelet.

Va inoltre assegnato il valore della pressione media calcolata sul volume del dominio CFD

$$\hat{p}(t) = \frac{\int_V \bar{p} dV}{\int_V dV} \quad (2.36)$$

a partire dalla distribuzione di $\bar{p}(\vec{x}, t)$ ricavata attraverso la risoluzione delle equazioni RANS.

2.2.2 Probability Density Function

La risoluzione delle equazioni del modello RIF richiedono l'utilizzo di una Probability Density Function (PDF), assunta a priori e che tenga conto delle fluttuazioni turbolente con scala inferiore rispetto alla griglia di calcolo. Visto le caratteristiche del modello RIF, generalmente è utilizzata la β -PDF, avente per input i campi di $\tilde{Z}(\vec{x}, t)$ e $\widetilde{Z''^2}(\vec{x}, t)$.

La β -PDF è calcolata come

$$\tilde{P}(Z; \vec{x}, t) = \frac{Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1}}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} \Gamma(\alpha + \beta) \quad (2.37)$$

dove Γ è la funzione gamma

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} t^{z-1} \exp(-t) dt \quad (2.38)$$

α e β sono pari a

$$\alpha = \tilde{Z} \gamma \quad (2.39)$$

$$\beta = (1 - \tilde{Z}) \gamma \quad (2.40)$$

con γ uguale a

$$\gamma = \frac{\tilde{Z} (1 - \tilde{Z})}{\widetilde{Z''^2}} - 1 \quad (2.41)$$

definito positivo.

A titolo esemplificativo in figura 2.5 sono rappresentate diverse β -PDF al variare di α e β .

Per valori di γ elevati la funzione assume il tipico andamento di una Gaussiana, con valore atteso pari a \tilde{Z} . Per $\alpha < 1$ la funzione ha un asintoto verticale in $Z = 0$, per $\beta < 1$ l'asintoto è spostato in $Z = 1$ mentre per α e β contemporaneamente minori di 1 la funzione presenta l'andamento asintotico sia per $Z = 0$ che per $Z = 1$

2.2.3 Integrazione delle frazioni massiche e della temperatura

Calcolata la soluzione delle equazioni del dominio flamelet è necessario ricavare il distribuzione della frazione massica di ogni specie chimica nel dominio CFD: l'accoppiamento dei

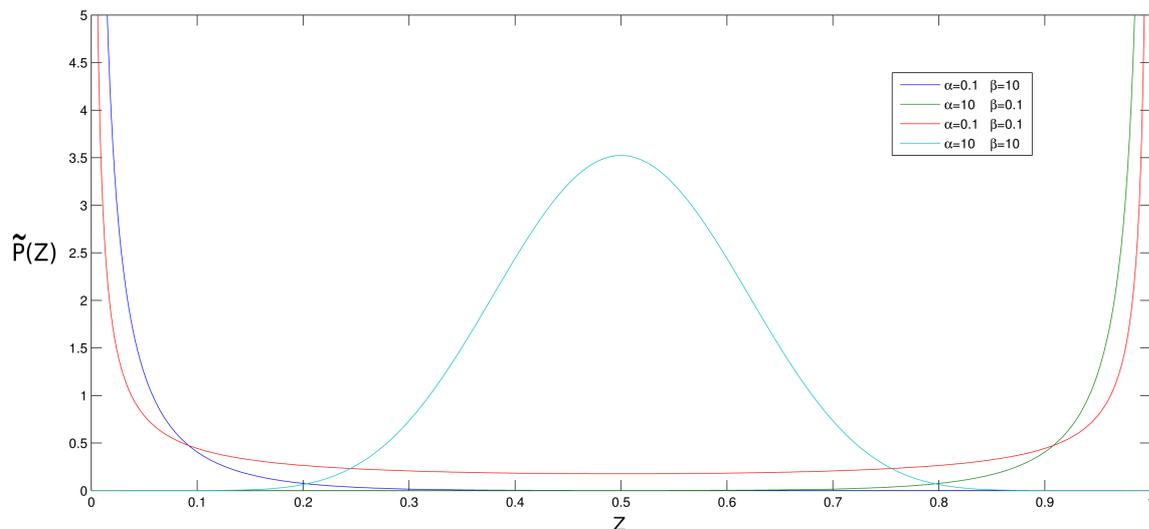


Figura 2.5: Esempi di β -PDF.

due domini avviene integrando la β -PDF e la soluzione del dominio chimico delle equazioni di trasporto delle specie chimiche

$$\tilde{Y}_i(\vec{x}, t) = \int_0^1 \tilde{P}(Z; \vec{x}, t) Y_i(Z, t) dZ \quad (2.42)$$

permettendo così di ricavare le frazioni massiche mediate nel dominio CDF senza risolvere nessuna reazione chimica direttamente nel dominio fisico.

Infine, il campo di temperatura \tilde{T} è ricavato iterativamente combinando il campo \tilde{h} ricavato dalle equazioni RANS e il campo delle frazioni massiche \tilde{Y}_i ricavato attraverso l'intergrazione della β -PDF

$$\tilde{h}(\vec{x}, t) = \sum_{i=1}^{NS} \tilde{Y}_i(\vec{x}, t) h_i(\tilde{T}(\vec{x}, t)) \quad (2.43)$$

dove h_i è l'entalpia termochimica della i -esima specie chimica valutata usando i polinomi NASA e assumendo comportamento di gas ideale.

2.2.4 Inizializzazione del dominio flamelet

Come il dominio CFD, anche il dominio flamelet necessita le sue condizioni al contorno e le sue condizioni iniziali. Risulta evidente la difficoltà nel definire a priori la distribuzione delle specie chimiche, dell'entalpia e della temperatura nel dominio Z all'istante iniziale: per risolvere questo impasse si fa ricorso alla soluzione di pure mixing.

Il profilo di entalpia sensibile e delle specie chimiche è quindi valutato a partire dalle condizioni al contorno per $Z = 0$ (lato ossidante) e per $Z = 1$ (lato combustibile) imponendo un profilo lineare, immaginando cioè una situazione di perfetto miscelamento. I profili

iniziali sono quindi definiti come

$$Y_i(Z) = (1 - Z)Y_{i,O} + ZY_{i,F} \quad (2.44)$$

$$h_s(Z) = (1 - Z)h_{s,O} + Zh_{s,F} \quad (2.45)$$

dove con O sono indicate le condizioni al contorno nell'istante iniziale dal lato dell'ossidante e con F quelle dal lato del combustibile.

A titolo esemplificativo sono riportati in figura 2.6 i profili iniziali delle specie chimiche e di temperatura per un caso RIF con n-eptano, le cui condizioni al contorno sono date in tabella 4.1.

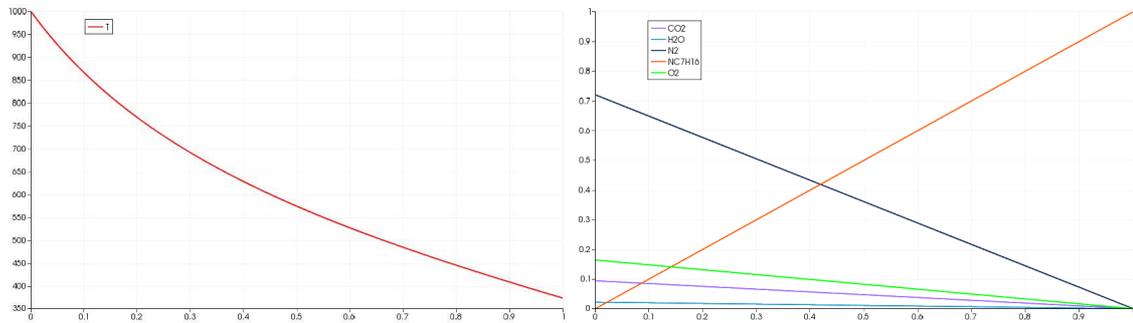


Figura 2.6: Inizializzazione del dominio flamelet.

Da notare come, nonostante la soluzione di pure mixing imponga un profilo lineare dell'entalpia sensibile nel dominio Z , il profilo di temperatura non assuma un andamento lineare: questo è da attribuirsi alla variazione del c_p in funzione della composizione.

Capitolo 3

I modelli mRIF

In questo capitolo si vogliono presentare alcune varianti del modello RIF, che possono essere incluse in una generica famiglia di modelli detta multiple Representative Interactive Flamelet (mRIF).

La struttura di fondo dei modelli mRIF rimane sostanzialmente la stessa del modello RIF presentato nel capitolo precedente: la modifica sostanziale si concentra nell'utilizzo di più (multiple) domini chimici (flamelet) per rappresentare l'avanzamento delle reazioni chimiche.

Il motivo principale per cui si giunge all'utilizzo di diversi flamelet è legato alla forte non omogeneità del campo di moto, della mixture fraction e della sua varianza, e quindi anche dello scalar dissipation rate, che si riscontra nei motori a combustione interna. La posizione cruciale dello scalar dissipation rate e l'influenza che quest'ultimo ha sull'evoluzione temporale della soluzione del dominio Z , suggerisce che l'utilizzo di più flamelet può migliorare la capacità di previsione delle fondamentali grandezze di interesse, quali la curva di pressione, la lunghezza di lift-off e la formazione degli inquinanti.

3.1 Eulerian Particle Flamelet model

Il modello Eulerian Particle Flamelet (EPFM), proposto da Barths in [20], integra i concetti appena espressi. I diversi flamelet vengono generati in sequenza secondo determinati criteri di suddivisione, e vengono tracciati all'interno del dominio CFD grazie a dei marker, facendo in modo che regioni differenti della camera di combustione vengano rappresentate da differenti flamelet, ognuno con la propria storia evolutiva.

Per ognuno dei marker è necessario risolvere un'equazione di trasporto euleriana per il campo scalare che rappresenta la probabilità di trovare il flamelet nella cella $\tilde{I}_l(\vec{x}, t)$

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{I}_l}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{I}_l}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\tilde{\rho} Sc_t} \frac{\partial \tilde{I}_l}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (3.1)$$

dove Sc_t è il numero di Schmidt turbolento.

Come evidenziato in [21] questo approccio deve garantire che:

- la variazione spaziale dello scalar dissipation rate sia ben rappresentata
- la storia dei diversi scalar dissipation rate sia funzione del campo di moto
- la soluzione sia indipendente dalla geometria del problema

Per ogni flamelet è quindi necessario calcolare il valore medio del conditional scalar dissipation rate at stoichiometric mixture $\widehat{\chi_{st,l}}$, il quale va pesato sulla base della probabilità di trovare il flamelet nel dominio CFD

$$\widehat{\chi_{st,l}}(t) = \frac{\int_V \widetilde{I}_l(\vec{x}, t) \widetilde{\chi_{st}}^{3/2} \widetilde{\rho} \widetilde{P}(Z_{st}) dV}{\int_V \widetilde{I}_l(\vec{x}, t) \widetilde{\chi_{st}}^{1/2} \widetilde{\rho} \widetilde{P}(Z_{st}) dV} \quad (3.2)$$

in analogia con l'equazione presentata nel capitolo precedente per il modello RIF.

Anche l'integrazione delle frazioni massiche nel dominio CFD risente della presenza di più flamelet: seguendo l'approccio proposto in [20] l'equazione che riporta il campo di composizione dal dominio flamelet al dominio fisico può essere estesa al caso multiple flamelet, scrivendo

$$\widetilde{Y}_i(\vec{x}, t) = \sum_{l=1}^{NF} \widetilde{I}_l(\vec{x}, t) \int_0^1 \widetilde{P}(Z; \vec{x}, t) Y_{i,l}(Z, t) dZ \quad (3.3)$$

dove NF è il numero di flamelet attivi, mentre $Y_{i,l}(Z, t)$ è la soluzione dell'equazione di trasporto delle specie chimiche nel dominio flamelet l -esimo. Calcolata la composizione del dominio fisico si ricava il campo di temperatura con la stessa procedura mostrata nel capitolo precedente.

Cruciale è inoltre la scelta dei criteri di suddivisione ed inizializzazione dei nuovi flamelet: è chiaro infatti che la logica con cui vengono generati i nuovi flamelet e il profilo iniziale di temperatura e composizione chimica che essi assumono, influenzano pesantemente la soluzione, sia nel dominio CFD che in quello chimico.

3.2 Interactive Eulerian Particle Flamelet model

Il modello Interactive Eulerian Particle Flamelet (IEPFM) è un'evoluzione del modello Eulerian Particle Flamelet esposto in precedenza: la principale differenza è che si ipotizza che i diversi flamelet possano interagire tra loro scambiandosi energia e massa. L'interazione tra i diversi flamelet è motivata dal fatto che le celle del dominio fisico possono essere rappresentate da più domini chimici: i campi scalari $\widetilde{I}_l(\vec{x}, t)$ assumono tipicamente valori molto al di sotto dell'unità, imponendo la convivenza di più flamelet nello stesso luogo e nel medesimo istante.

In accordo con [22], l'interazione tra i flamelet risulta essere indipendente dall'integrazione delle equazioni fondamentali dei domini chimici e può essere modellata attraverso

una generica funzione $\Psi_{i,l}$, definita come

$$Y_{i,l}^*(Z, t_{end}) = \Psi_{i,l} \left(Y_{i,l}(Z, t_{start}), \vec{\theta}(t_{start}) \right) \quad (3.4)$$

dove con t_{start} e t_{end} sono indicati il tempo in cui l'interazione tra i flamelet ha inizio e fine mentre $\vec{\theta}(t_{start})$ è il vettore dei parametri del modello.

La conservazione della massa è garantita imponendo che

$$\sum_{i=1}^{NS} \Psi_{i,l} = 1 \quad (3.5)$$

dove con NS è indicato il numero di specie chimiche.

Vengono ora proposti i due modelli di interazione proposti da Mayer nel suo lavoro di tesi [22]: il modello Attack interaction e il modello PDF-weighted interaction.

3.2.1 Attack interaction model

Il modello Attack interaction propone di valutare l'interazione tra i flamelet attraverso opportune combinazioni lineari delle soluzioni delle equazioni di trasporto delle specie chimiche nei domini chimici.

La composizione del dominio chimico l è quindi valutata a partire dalla sua composizione e da quella dei k flamelet nell'istante iniziale t_{start} in cui avviene il fenomeno di interazione, ed è calcolata come

$$Y_{i,l}^*(Z, t_{end}) = Y_{i,l}(Z, t_{start}) + \sum_{k=1}^{NF} \frac{Q_{l,k}(t_{start})}{\tau_{l,k}(t_{start})} [Y_{i,k}(Z, t_{start}) - Y_{i,l}(Z, t_{start})] (t_{end} - t_{start}) \quad (3.6)$$

dove con $Q_{l,k}$ sono indicati gli attack factor e con $1/\tau_{l,k}$ i mixing rate.

I coefficienti della matrice Q variano tra 0 e 1 e tengono conto dell'interazione tra i flamelet dovuta alla sovrapposizione nel dominio CFD dei campi \tilde{I}_l , i quali vengono calcolati come

$$Q_{l,k}(t) = \frac{\int_V \Phi_l(\vec{x}, t) \Phi_k(\vec{x}, t) \bar{\rho}(\vec{x}, t) \tilde{Z}_l(\vec{x}, t) dV}{\int_V \Phi_l(\vec{x}, t) \bar{\rho}(\vec{x}, t) \tilde{Z}_l(\vec{x}, t) dV} \quad (3.7)$$

dove $\tilde{Z}_l(\vec{x}, t)$ è per definizione

$$\tilde{Z}_l(\vec{x}, t) = \tilde{I}_l(\vec{x}, t) \tilde{Z}(\vec{x}, t) \quad (3.8)$$

mentre $\Phi_i(\vec{x}, t)$ è pari

$$\Phi_i(\vec{x}, t) = \begin{cases} 1 & \text{se } \tilde{Z}_i(\vec{x}, t) \geq \frac{Z_{st}}{100} \\ 0 & \text{se } \tilde{Z}_i(\vec{x}, t) < \frac{Z_{st}}{100} \end{cases} \quad (3.9)$$

dove Z_{st} è la mixture fraction per una miscela stechiometrica.

Per quanto riguarda i coefficienti della matrice $1/\tau$, essi rappresentano l'intensità con cui avviene l'interazione tra i flamelet: sotto l'ipotesi che lo scambio sia influenzato prevalentemente dalla turbolenza, essi possono essere calcolati come

$$\frac{1}{\tau_{l,k}(t)} = \frac{\int_V \Phi_l(\vec{x}, t) \Phi_k(\vec{x}, t) \bar{\rho}(\vec{x}, t) \frac{\tilde{\varepsilon}(\vec{x}, t)}{\tilde{k}(\vec{x}, t)} dV}{\int_V \Phi_l(\vec{x}, t) \bar{\rho}(\vec{x}, t) dV} \quad (3.10)$$

dove $\tilde{\varepsilon}$ è il tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta mentre \tilde{k} è l'energia cinetica turbolenta.

3.2.2 PDF-weighted interaction model

L'idea alla base del PDF-weighted interaction model è che sia la massa ad essere scambiata tra i flamelet e non le frazioni massiche. Per definizione, la massa attribuita ad un flamelet può essere calcolata come

$$\widehat{m}_l(t) = \int_V \bar{\rho}(\vec{x}, t) \tilde{Z}_l(\vec{x}, t) dV \quad (3.11)$$

e può essere valutata nel dominio Z introducendo la β -PDF $\tilde{P}(Z; \vec{x}, t)$ come

$$\widehat{m}_l(Z_1, Z_2, t) = \int_V \int_{Z_1}^{Z_2} \bar{\rho}(\vec{x}, t) \tilde{Z}_l(\vec{x}, t) \tilde{P}(Z; \vec{x}, t) dZ dV \quad (3.12)$$

in modo da poter stimare la quantità di massa associata ad un intervallo arbitrario di mixture fraction $\Delta Z = Z_2 - Z_1$. Assumendo che $\tilde{P}(Z; \vec{x}, t)$ sia circa costante nell'intervallo ΔZ , la massa $\widehat{m}_l(Z, t)$ può essere valutata come

$$\widehat{m}_l(Z, t) = \int_V \bar{\rho}(\vec{x}, t) \tilde{Z}_l(\vec{x}, t) \tilde{P}(Z; \vec{x}, t) \Delta Z dV \quad (3.13)$$

L'introduzione della β -PDF permette di tener conto anche dell'età del flamelet nel calcolo dello scambio di massa. Come visto nel capitolo precedente, la forma della β -PDF è funzione di \tilde{Z} e \tilde{Z}''^2 : i flamelet più giovani hanno β -PDF caratterizzate da due asintoti in prossimità di $Z = 0$ e $Z = 1$, mentre quelli in più anziani assumono un profilo ad un picco, localizzato nell'intorno di \tilde{Z} calcolato nella cella.

Assumendo la stessa funzione di interazione proposta per il modello Attack interaction, la massa scambiata può essere valutata come

$$\begin{aligned} \widehat{m}_l(Z, t_{end}) &= \widehat{m}_l(Z, t_{start}) + \\ &+ \sum_{k=1}^{NF} \frac{Q_{l,k}^*(t_{start})}{\tau_{l,k}^*(t_{start})} [\widehat{m}_k(Z, t_{start}) - \widehat{m}_l(Z, t_{start})] (t_{end} - t_{start}) \end{aligned} \quad (3.14)$$

dove con $Q_{l,k}^*$ sono indicati gli overlapping factor e con $\tau_{l,k}^*$ i mixing rate.

Lo scambio di frazioni massiche tra i flamelet può essere facilmente ricavato ricordando che

$$\widehat{m}_{i,l}(Z, t) = \widehat{m}_l(Z, t) Y_{i,l}(Z, t) \quad (3.15)$$

dando così luogo alla forma definitiva del modello di interazione, che diventa

$$\begin{aligned} \widehat{m}_l(Z, t_{end}) Y_{i,l}(Z, t_{end}) &= \widehat{m}_l(Z, t_{start}) Y_{i,l}(Z, t_{start}) + \\ &+ \sum_{k=1}^{NF} \frac{Q_{l,k}^*(t_{start})}{\tau_{l,k}^*(t_{start})} [\widehat{m}_k(Z, t_{start}) Y_{i,l}(Z, t_{start}) + \\ &- \widehat{m}_l(Z, t_{start}) Y_{i,l}(Z, t_{start})] (t_{end} - t_{start}) \end{aligned} \quad (3.16)$$

arrivando infine a scrivere che

$$\begin{aligned} Y_{i,l}^*(Z, t_{end}) &= \frac{\widehat{m}_l(Z, t_{start}) Y_{i,l}(Z, t_{start})}{\widehat{m}_l(Z, t_{start}) + \sum_{k=1}^{NF} \frac{Q_{l,k}^*(t_{start})}{\tau_{l,k}^*(t_{start})} [\widehat{m}_k(Z, t_{start}) - \widehat{m}_l(Z, t_{start})] \Delta t} + \\ &+ \frac{\sum_{k=1}^{NF} \frac{Q_{l,k}^*(t_{start})}{\tau_{l,k}^*(t_{start})} [\widehat{m}_k(Z, t_{start}) Y_{i,l}(Z, t_{start}) - \widehat{m}_l(Z, t_{start}) Y_{i,l}(Z, t_{start})] \Delta t}{\widehat{m}_l(Z, t_{start}) + \sum_{k=1}^{NF} \frac{Q_{l,k}^*(t_{start})}{\tau_{l,k}^*(t_{start})} [\widehat{m}_k(Z, t_{start}) - \widehat{m}_l(Z, t_{start})] \Delta t} \end{aligned} \quad (3.17)$$

dove $\Delta t = t_{end} - t_{start}$ e $Y_{i,l}^*(Z, t_{end})$ è la frazione massica della specie i -esima nel dominio chimico l -esimo terminata l'interazione.

I coefficienti della matrice Q^* tengono conto della sovrapposizione dei flamelet l e k : i termini $Q_{l,k}^*$ sono definiti come

$$Q_{l,k}^*(t) = \frac{2 \int_V \widetilde{Z}_l(\vec{x}, t) \widetilde{Z}_k(\vec{x}, t) \overline{\rho}(\vec{x}, t) dV}{\int_V [\widetilde{Z}_l(\vec{x}, t)^2 + \widetilde{Z}_k(\vec{x}, t)^2] \overline{\rho}(\vec{x}, t) dV} \quad (3.18)$$

descrivendo così il rapporto tra la massa catturata da entrambi i flamelet e la somma delle due.

In completa analogia con il modello Attack interaction, la matrice $1/\tau^*$ rappresenta l'influenza della turbolenza sul fenomeno di interazione: riprendendo la relazione presentata precedentemente, i coefficienti $1/\tau_{l,k}^*$ possono essere scritti a partire dalla scala temporale globale della turbolenza $\tau_L = k/\varepsilon$ come

$$\frac{1}{\tau_{l,k}^*(t)} = \frac{\int_V \widetilde{Z}_l(\vec{x}, t) \widetilde{Z}_k(\vec{x}, t) \frac{\overline{\varepsilon}(\vec{x}, t)}{\overline{k}(\vec{x}, t)} \overline{\rho}(\vec{x}, t) dV}{\int_V [\widetilde{Z}_l(\vec{x}, t)^2 + \widetilde{Z}_k(\vec{x}, t)^2] \overline{\rho}(\vec{x}, t) dV} \quad (3.19)$$

o, in alternativa, a partire dalla scala temporale di Kolmogorov $\tau_\eta = \sqrt{\frac{\nu}{\varepsilon}}$, la quale è caratteristica dei vortici più piccoli nei quali avviene la dissipazione dell'energia cinetica

turbolenta k in energia termica, scrivendo quindi

$$\frac{1}{\tau_{l,k}^*(t)} = \frac{\int_V \tilde{Z}_l(\vec{x}, t) \tilde{Z}_k(\vec{x}, t) \sqrt{\frac{\tilde{\varepsilon}(\vec{x}, t)}{\nu(\vec{x}, t)}} \bar{\rho}(\vec{x}, t) dV}{\int_V \left[\tilde{Z}_l(\vec{x}, t)^2 + \tilde{Z}_k(\vec{x}, t)^2 \right] \bar{\rho}(\vec{x}, t) dV} \quad (3.20)$$

dove ν è la viscosità cinematica del fluido.

3.3 Criteri di suddivisione dei domini chimici

Definite le principali caratteristiche dei modelli mRIF, è ora necessario discutere dei criteri di suddivisione dei domini chimici: è evidente infatti come una corretta logica di generazione dei flamelet permetta di raggiungere gli obiettivi che i modelli a più flamelet si prefissano, in particolar modo per quanto riguarda l'evoluzione temporale dei diversi $\widehat{\chi_{st,l}}(t)$.

In letteratura sono presenti numerosi criteri di suddivisione, che possono però essere ricondotti a due macro famiglie: i criteri basati sulla varianza dello scalar dissipation rate, inizialmente proposti da Barths in [20], e i criteri basati sulla massa di combustibile iniettato, descritti da Vogel in [23] e Lehtiniemi in [24].

Prima di passare alla descrizione dei criteri di suddivisione è però necessaria una precisazione: la soluzione dei campi scalari \tilde{I}_l passa in realtà attraverso la risoluzione delle equazioni di trasporto dei campi euleriani \tilde{Z}_l . Ricordando infatti che

$$\tilde{I}_l(\vec{x}, t) = \frac{\tilde{Z}_l(\vec{x}, t)}{\tilde{Z}(\vec{x}, t)} \quad (3.21)$$

è evidente come la risoluzione dell'equazione di trasporto di \tilde{Z}_l sia equivalente a quella dei campi \tilde{I}_l , con un sostanziale vantaggio: nell'equazione di trasporto di \tilde{Z}_l

$$\frac{\partial \tilde{p} \tilde{Z}_l}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{p} \tilde{u}_i \tilde{Z}_l}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_t}{S_{ct,Z}} \frac{\partial \tilde{Z}_l}{\partial x_i} \right) + \nu_l \tilde{p} \tilde{S} \quad (3.22)$$

è presente un termine sorgente, rappresentante il nuovo combustibile evaporato, che può essere facilmente allocato al flamelet desiderato imponendo una condizione del tipo delta di Kronecker per ν_l .

3.3.1 Criteri basati sulla varianza dello scalar dissipation rate

I criteri basati sulla varianza dello scalar dissipation rate sono la naturale soluzione ad uno dei principali obiettivi che i metodi mRIF si prefiggono: la variazione spaziale dello scalar dissipation rate deve essere adeguatamente tenuta in conto, in particolar modo per quanto riguarda l'influenza che esso ha sulla soluzione delle equazioni di trasporto nei diversi domini flamelet.

Come per ogni modello mRIF, il dominio CFD è rappresentato da un unico flamelet all'inizio della simulazione: l'iniezione di combustibile ad elevata velocità, allocato inizialmente nell'unico dominio chimico attivo, genera in prossimità dell'iniettore una zona ad elevatissimo scalar dissipation rate $\tilde{\chi}$. I vapori di combustibile, allontanandosi rapidamente da questa prima regione, attraversano quindi zone caratterizzate da valori di scalar dissipation rate significativamente inferiori. Il criterio di suddivisione proposto da Barths impone che il combustibile associato al primo flamelet venga suddiviso con un nuovo flamelet qualora si realizzino contemporaneamente le seguenti condizioni:

- il valor medio dello scalar dissipation rate non è in aumento
- la deviazione standard dello scalar dissipation rate è maggiore del 15%
- il flamelet rappresenta almeno $\frac{0.5}{NF}$ della massa totale di combustibile da iniettare
- la massa di combustibile rappresentato dal flamelet deve essere almeno per $\frac{0.5}{NF_{active}}$ entro un certo intervallo di mixture fraction intorno al valore stechiometrico

dove con NF è indicato il numero di flamelet massimo che si ha intenzione di usare mentre NF_{active} è il numero di flamelet attivi presenti nel dominio CFD.

Quando queste quattro condizioni sono contemporaneamente realizzate, viene attivato un nuovo flamelet, al quale viene attribuita la regione con scalar dissipation rate inferiore al valore medio: il flamelet madre invece continua ad essere rappresentativo delle regioni a più alto scalar dissipation rate, localizzate in prossimità dell'ugello dell'iniettore, e del nuovo combustibile iniettato dopo la prima suddivisione.

La procedura si ripete identica, con il primo flamelet che acquisisce via via massa di combustibile fino al realizzarsi delle quattro condizioni con il conseguente sdoppiamento in flamelet madre e flamelet figlio.

Nei prossimi capitoli saranno presentati altri criteri di suddivisione basati sulla varianza dello scalar dissipation rate formulati durante questo lavoro volti a risolvere problematiche riscontrate, sia dal punto di vista delle condizioni necessarie per la suddivisione, della logica di gestione dei flamelet che del criterio di redistribuzione della massa tra il flamelet madre e il figlio.

3.3.2 Criteri basati sulla massa di combustibile iniettato

Mentre i criteri basati sulla varianza dello scalar dissipation rate cercano di suddividere spazialmente i vapori di combustibile presenti nel dominio CFD, i criteri basati sulla massa di combustibile iniettato utilizzano una risoluzione temporale della mixture fraction come principio di suddivisione dei diversi domini chimici.

Calcolando la massa di combustibile attribuita ad un singolo flamelet come

$$m_{F,l} = \int_V \bar{\rho} \tilde{Z}_l dV \quad (3.23)$$

e imponendo, come generalmente accade, che ad ogni flamelet venga associata la stessa quantità di combustibile, il criterio basato sulla massa di combustibile iniettato ha come condizione necessaria affinché avvenga l'attivazione di un nuovo flamelet che

$$\frac{\int_V \bar{\rho} \tilde{Z}_l dV}{m_{F,inj}} \geq \frac{1}{NF} \quad (3.24)$$

dove con $m_{F,inj}$ è indicata la massa di combustibile da iniettare e con NF il numero di flamelet che si intende utilizzare per rappresentare la massa di combustibile da iniettare.

La nuova massa di combustibile iniettato viene da ora allocata al flamelet appena generato: scompare quindi il legame flamelet madre-figlio presente nei criteri basati sulla varianza dello scalar dissipation rate, in quanto non è più presente la nascita del nuovo flamelet a partire da una costola del flamelet iniziale.

Anche per i criteri basati sulla massa di combustibile iniettato verranno proposti in seguito altre varianti, sviluppate durante questo lavoro, nate sotto l'impulso di una miglior descrizione dei principali fenomeni che caratterizzano la combustione nei motori Diesel.

3.4 Inizializzazione dei domini chimici

Come già presentato nel capitolo precedente, la scelta del profilo iniziale delle specie chimiche e dell'entalpia nei domini Z è cruciale anche per i modelli mRIF: presa per assodata la scelta della soluzione di pure mixing per il profilo iniziale del primo flamelet, sorge ora il problema dell'inizializzazione dei profili nei domini Z dei flamelet generati in sequenza.

Vengono ora presentate le due soluzioni utilizzate in questo lavoro: l'approccio Clone e l'approccio NoClone.

3.4.1 Clone

La prima soluzione proposta è l'approccio Clone: come lascia intendere il nome, l'utilizzo di questo approccio prevede che i flamelet generati in sequenza non siano altro che dei cloni del flamelet precedente.

I flamelet, all'istante in cui avviene la generazione del nuovo flamelet, assumono quindi profili di entalpia e specie chimiche senza soluzioni di continuità tra i diversi domini chimici: dal punto di vista del fenomeno fisico, è chiaro come questa soluzione sia ideale nel caso in cui i flamelet vengano generati seguendo i criteri basati sulla varianza dello scalar dissipation rate, in quanto i nuovi flamelet vengono generati da una frazione del flamelet madre. Nonostante questo, l'approccio Clone è utilizzato, come si vedrà in seguito, anche in casi in cui la suddivisione dei flamelet sia basata sulla massa di combustibile iniettato.

3.4.2 NoClone

L'approccio NoClone, in completa antitesi con quello Clone, utilizza la soluzione di pure mixing anche per i nuovi flamelet generati in sequenza.

I flamelet sono quindi inizializzati indipendentemente uno dall'altro: dal punto di vista del fenomeno fisico, è chiaro che l'approccio NoClone sia più indicato nel caso in cui si utilizzino i criteri di suddivisione basati sulla massa di combustibile iniettato, essendo assente il legame madre-figlio che caratterizza i criteri di suddivisione basati sulla varianza dello scalar dissipation rate.

Per maggiori dettagli si rimanda ai prossimi capitoli, nei quali verranno analizzati sia gli effetti del criterio di suddivisione che dell'approccio di inizializzazione dei nuovi flamelet.

Capitolo 4

Il solver RIFdieselFoam

In questo capitolo verranno presentati il solutore `RIFdieselFoam` e i risultati delle prime simulazioni effettuate con questo solver, incentrate principalmente sull'analisi dell'influenza del numero di flamelet, dell'approccio con cui vengono inizializzati i flamelet nei modelli nel caso di flamelet multipli e dello schema cinetico utilizzato.

Il solver `RIFdieselFoam` è stato implementato all'interno della libreria *Lib-ICE* [25], interamente sviluppata dal gruppo di Motori a Combustione Interna del Politecnico di Milano: questa libreria, basata sul software CFD open source *OpenFOAM*, comprende numerosi solver, spaziando dai processi di combustione alla fluidodinamica passando per la modellazione di fenomeni multifase, e utility di pre-processing e post-processing, finalizzate principalmente allo studio dei motori a combustione interna, siano essi ad accensione comandata o per compressione.

Per poter meglio inquadrare il lavoro svolto, verranno ora presentati, in estrema sintesi, *OpenFOAM* e la *Lib-ICE*, per poi passare all'analisi delle simulazioni svolte sulla campagna sperimentale Spray H, coordinata dal gruppo Engine Combustion Network (ECN) del Sandia National Laboratories (SNL).

4.1 *OpenFOAM*

OpenFOAM, acronimo di Open Field Operation and Manipulation, è un software CFD gratuito ed open source, che può essere usato in diversi campi dell'ingegneria, delle scienze e della finanza, sia per fini commerciali che accademici. *OpenFOAM* include più di 80 solver e più di 170 utility di pre-processing e post-processing, scritti nella quasi totalità in C++: la natura open source di *OpenFOAM* unito al fatto che esso sia scritto in C++, uno dei linguaggi di programmazione più noti ed utilizzati, permette di poter programmare solver ed utility *ad hoc*, abbattendo così i confini di applicabilità del software. Esempio lampante ne è la *Lib-ICE*, la quale sfrutta la base più che solida di *OpenFOAM* per modellare i motori a combustione interna: in questo lavoro sono state sviluppate diverse varianti del codice presente nella *Lib-ICE* e implementate nuove parti sia per analisi fondamentali

dell'influenza dei diversi parametri sulla struttura di fiamma che per cercare di migliorare le performance.

Il codice sorgente di *OpenFOAM* è all'apparenza un complesso dedalo di linee di codice: in realtà l'architettura ad oggetti, tipica di C++, permette di ottenere un'estrema snellezza e regolarità della struttura del programma, che può essere schematizzato, almeno in linea di principio, come in figura 4.1.

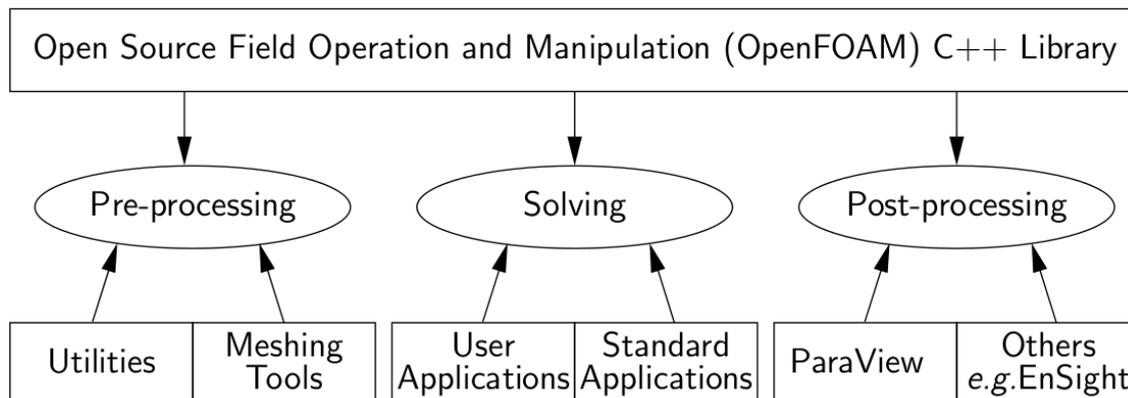


Figura 4.1: Struttura base di *OpenFOAM*, [26].

Le fasi principali dell'analisi CFD (pre-processing, solving e post-processing) possono essere interamente realizzate all'interno dell'ambiente *OpenFOAM*, utilizzando indifferentemente codice già presente nell'installazione base o prodotto dall'utente.

4.2 *Lib-ICE*

La *Lib-ICE* è un set di applicazioni e librerie completamente sviluppato dal gruppo di Motori a Combustione Interna del Politecnico di Milano: sviluppata a partire dalla struttura di *OpenFOAM* permette lo studio dei complessi fenomeni che interagiscono all'interno dei motori a combustione interna, con possibili estensioni a molteplici campi di applicazione. All'interno della *Lib-ICE* sono implementati numerosi modelli per lo studio di fenomeni chimici e fisici, da modelli di formazione dello spray a modelli di combustione passando per i modelli fluidodinamici, e tool di pre-processing e post-processing.

La struttura base della *Lib-ICE*, riportata in figura 4.3, rispecchia la struttura base di *OpenFOAM*: entrando nella *Lib-ICE* si trovano due importanti cartelle, la cartella *src* e la cartella *applications*.

La cartella *src* contiene le librerie implementate nella *Lib-ICE*, ad esempio il modello lagrangiano di spray, i solver chimici, i modelli di formazione degli inquinanti e i modelli termodinamici, condivise e utilizzate dai numerosi solver della *Lib-ICE*, contenuti a loro volta nella cartella *applications*. La cartella *applications* è completata da numerosi tool di pre-processing, da quello impiegato per inizializzare i flamelet per i modelli RIF al-

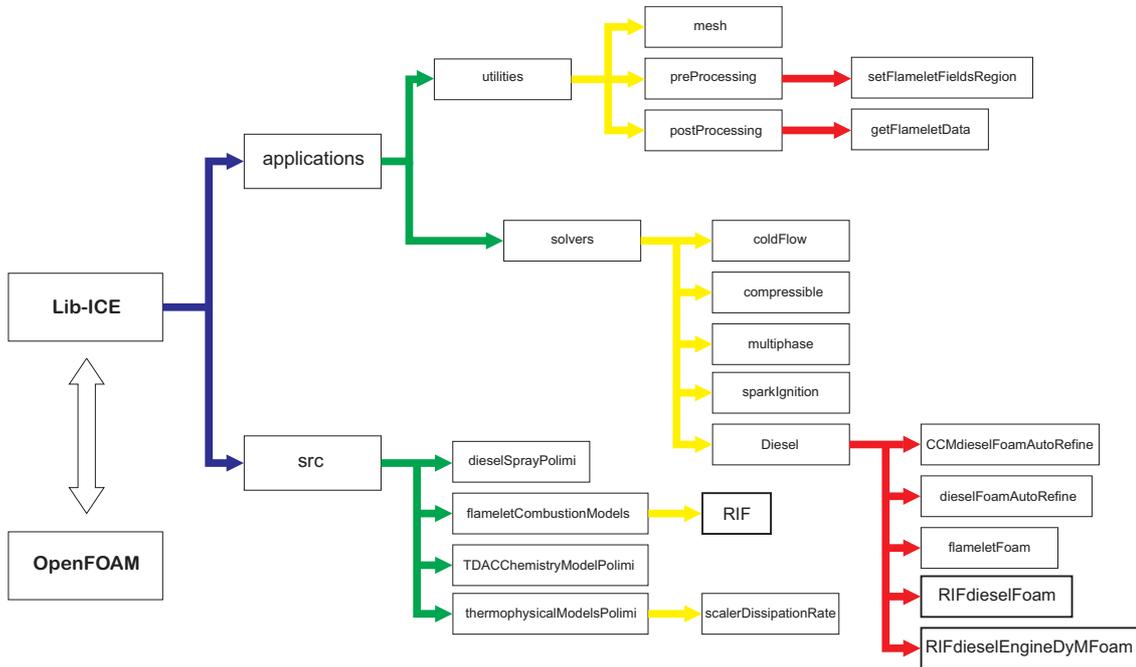


Figura 4.2: Struttura base della *Lib-ICE*.

l'inizializzazione del campo di moto, tool di generazione e modifica delle mesh e tool di post-processing, utili ad estrarre grandezze di interesse dall'output dei solver.

All'interno della *Lib-ICE*, costantemente aggiornata e migliorata dal ICE group del Politecnico di Milano, è implementato il solver `RIFdieselFoam`, utilizzato e modificato in questo lavoro, che risolve le equazioni del modello RIF, sia con singolo flamelet che con più flamelet, in reattori a volume costante: al momento del setup del caso è possibile inoltre scegliere se utilizzare il criterio di inializzazione Clone o quello NoClone, se utilizzare un modello di interazione e quanti flamelet utilizzare, permettendo quindi di spaziare tutte le possibilità presentate in precedenza. Il criterio di suddivisione dei flamelet basato sulla varianza dello scalar dissipation rate, utilizzato in misura inferiore rispetto a quello basato sulla massa di combustibile iniettato per questo lavoro, è implementato nel solver `RIFdieselFoamChi`: nonostante lavori precedenti, [25], abbiano dimostrato un miglior comportamento del criterio di suddivisione basato sulla massa di combustibile iniettato, si è comunque deciso di utilizzare a titolo di confronto e di modificarne la struttura, come verrà presentato nei prossimi capitoli. In [25] è presente la validazione del modello su un ampio range di condizioni operative. Il solver `RIFdieselEngineDyMFoam` è stato implementato per utilizzare i modelli RIF nel caso di simulazioni di motori a combustione interna, quindi con volume variabile nel tempo e condizioni termodinamiche e di moto della carica influenzati non solo dalla presenza dello spray di combustibile.

4.3 RIFdieselFoam

Viene ora presentata la struttura del solver `RIFdieselFoam`: come detto il solver utilizza i modelli RIF per simulare il processo di combustione in fiamme turbolente non-premiscelate in reattori a volume costante.

Il codice attinge a numerose librerie, presenti e nella distribuzione `OpenFOAM` e implementate all'interno della `Lib-ICE`, per modellare i diversi fenomeni presenti nelle fiamme Diesel.

In figura 4.3 è riportata in estrema sintesi la struttura base del codice: come è facile aspettarsi, il codice riprende la logica del modello RIF presentata nei capitoli precedenti.

Lib-ICE

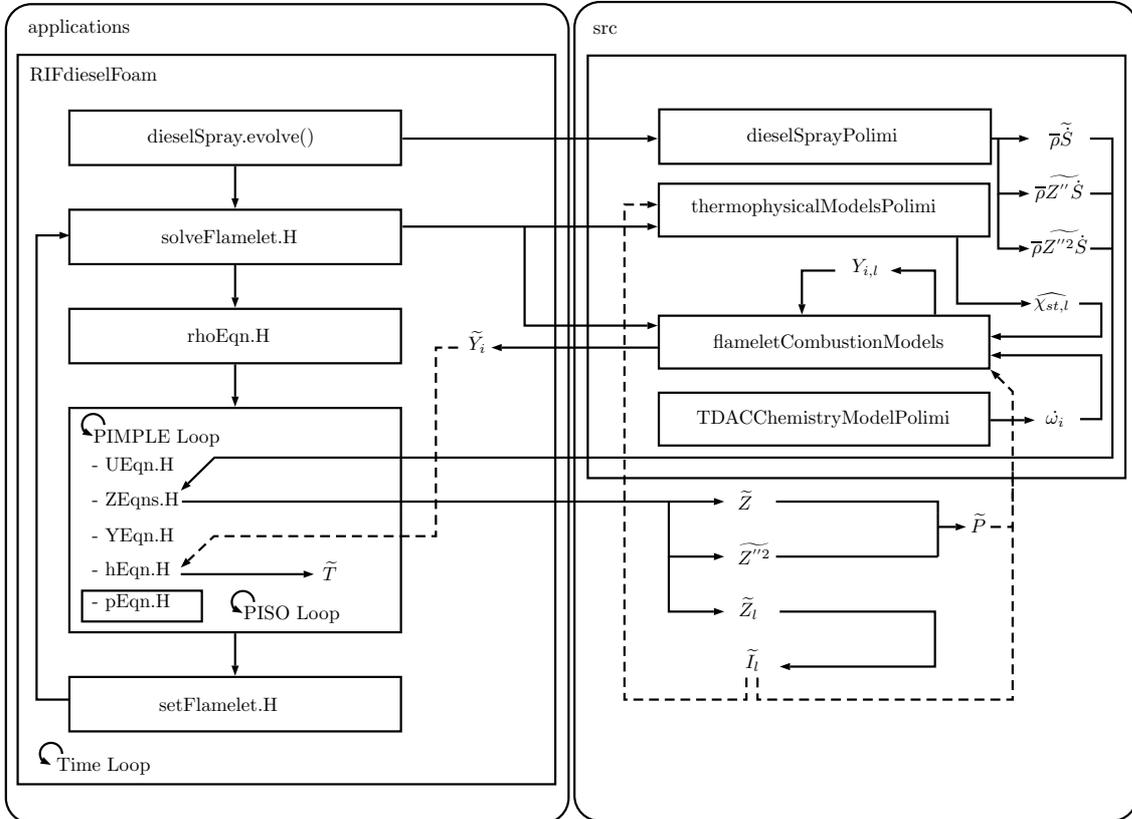


Figura 4.3: Struttura base del solver `RIFdieselFoam`.

Per prima cosa il codice richiama la libreria `dieselSprayPolimi`, nel quale è implementato il solver lagrangiano che risolve l'iniezione di combustibile, diversi modelli di atomizzazione, breakup ed evaporazione, e modella quindi la struttura dello spray. Da qui è possibile calcolare il termine sorgente nell'equazione di \tilde{Z} e \tilde{Z}''^2 , centrali nel modello RIF considerata l'importanza della β -PDF.

A questo punto il solver calcola le soluzioni delle equazioni di governo dei domini flamelet attivi, previa aver calcolato i valori di $\widehat{\chi}_{st,l}$ e le velocità di produzione/dissipazione per ogni specie chimica considerata. In seguito si procede con la risoluzione delle equazioni

di trasporto nel dominio fisico utilizzando l'algoritmo PIMPLE.

Integrate le composizione delle specie chimiche nel dominio fisico e risolta l'equazione di trasporto dell'energia nello stesso dominio, è possibile quindi ricavare il campo di temperatura anche per il dominio CFD. La risoluzione del time step si conclude con il controllo del criterio di suddivisione dei flamelet e la generazione del nuovo flamelet nel caso in cui sia verificato.

4.4 Engine Combustion Network

La validazione, la verifica e lo studio di sensitività del solver `RIFdieselFoam` è stata effettuata utilizzando i dati sperimentali forniti dall'Engine Combustion Network [28], un network di istituzioni accademiche e non nato, per condividere e coordinare numerose campagne sperimentali e analisi CFD nell'ambito dei motori a combustione interna.

Le campagne sperimentali, standardizzate da un regolamento redatto dall'ECN, sono effettuate con combustibili surrogati aventi caratteristiche simili per proprietà chimiche e fisiche al Diesel stradale in reattori a volume costante, dette bombe, in condizioni tipiche di funzionamento dei motori Diesel.

4.4.1 Caratteristiche degli esperimenti in bomba

La bomba è una camera di combustione a volume costante cubica di lato 108 mm e con aperture ottiche di zaffiro su ogni lato aventi diametro di 105 mm: da queste aperture sono effettuate rilevazioni laser, schlieren e ottiche che permettono di avere dati sperimentali di grande interesse, utili per comprendere a fondo il processo di combustione di fiamme Diesel, accoppiate con le classiche misurazioni di temperatura e pressione in camera.

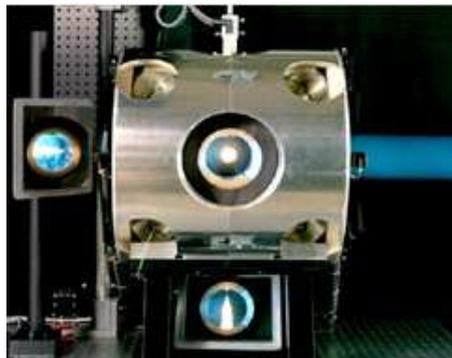


Figura 4.4: Fotografia dell'esterno della bomba Sandia, [28].

Le condizioni ambiente in camera di combustione possono essere regolate per rappresentare i diversi punti di funzionamento in cui un motore Diesel può trovarsi a lavorare. Le condizioni della carica fresca nel vessel possono variare tra:

- temperatura dei gas tra 450 K e 1300 K

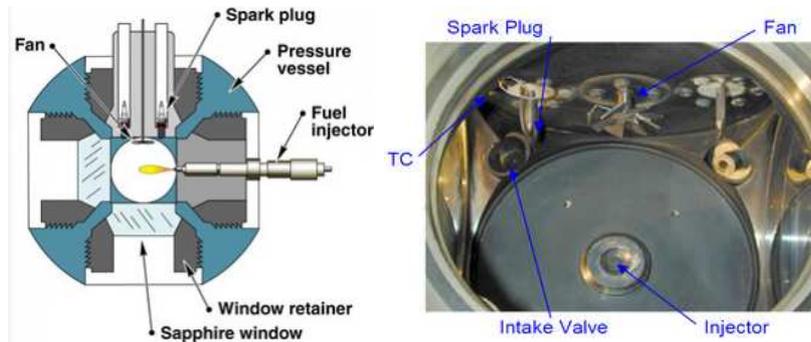


Figura 4.5: Schema e fotografia dell'interno della bomba Sandia, [28].

- densità dei gas tra 3 kg/m^3 e 60 kg/m^3
- frazione molare di ossigeno nei gas tra 0% e 21%

Il combustibile è iniettato con un sistema di iniezione common-rail con pressioni di iniezione che variano da 40 a 200 MPa utilizzando iniettori a solenoide Bosch con diametro da 0.05 a 0.5 mm.

La scelta del combustibile surrogato è cambiata con le campagne sperimentali: mentre per la campagna sperimentale Spray H è stato utilizzato normal-eptano, per la campagna sperimentale Spray A si è fatto ricorso al normal-dodecano.

4.5 Analisi fondamentale basata sulla campagna sperimentale Spray H

Si procede ora con la descrizione dei risultati delle simulazioni basate sulla campagna sperimentale Spray H: utilizzando i dati sperimentali forniti dall'ECN, è stato effettuato uno studio dell'influenza del numero di flamelet utilizzati per rappresentare il combustibile iniettato, del criterio di inizializzazione dei domini chimici nel caso di flamelet multipli e l'incidenza dello schema cinetico.

Si procede quindi con la descrizione del setup del caso, per poi passare all'analisi dei risultati ottenuti.

4.5.1 Condizioni termodinamiche

Per prima cosa si procede a descrivere le condizioni termodinamiche del caso utilizzato in quest'analisi. Come detto in precedenza, il combustibile utilizzato per la campagna sperimentale Spray H è il normal-eptano: alcano lineare formato da 7 atomi di carbonio e 16 atomi di idrogeno, ha caratteristiche chimico-fisiche simili al Diesel stradale, ha per definizione numero di ottano 0 e numero di cetano 56, valore simile al numero di cetano del Diesel stradale che si aggira intorno a 50.

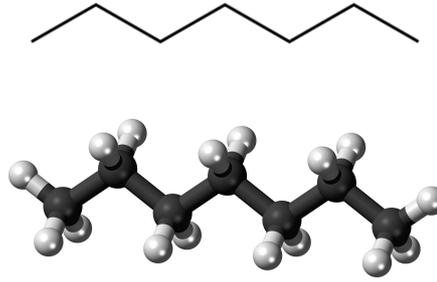


Figura 4.6: Formula di struttura e geometria del n-eptano.

La composizione dell'aria e le temperature di combustibile e ossidante sono forniti in tabella 4.1.

	OX	F
$T [K]$	1000	373
Y_{O_2}	0.164	0
Y_{N_2}	0.720	0
Y_{CO_2}	0.094	0
Y_{H_2O}	0.022	0
$Y_{NC_7H_{16}}$	0	1

Tabella 4.1: Condizioni termodinamiche del caso Spray H studiato.

La pressione in camera è pari a 4.25 MPa, a cui corrisponde una densità nominale dell'aria di 14.8 kg/m³ e un fattore di comprimibilità di 1.01.

4.5.2 Mesh

Si procede ora a descrivere le caratteristiche delle mesh di calcolo utilizzate per le simulazioni in bomba dei casi Spray H. Come già evidenziato in precedenza, il modello di combustione RIF prevede il disaccoppiamento del dominio fisico da quello chimico. Non sorprenderà quindi il fatto che siano due le griglie di calcolo utilizzate: la prima rappresenta il dominio fisico CFD, la seconda il dominio chimico flamelet.

Vista la natura assialsimmetrica del problema nel dominio fisico, la bomba è stata rappresentata da un cono, mostrato in figura 4.7, con apertura di 5° avente lati di 54 e 108 mm.

Il dominio, di volume 13.724 cm³, è stato discretizzato utilizzando una mesh cartesiana di 23328 celle, 108 lungo la direzione x , 216 lungo la direzione z e 1 in y , con un pesante infittimento in prossimità del nozzle dell'iniettore.

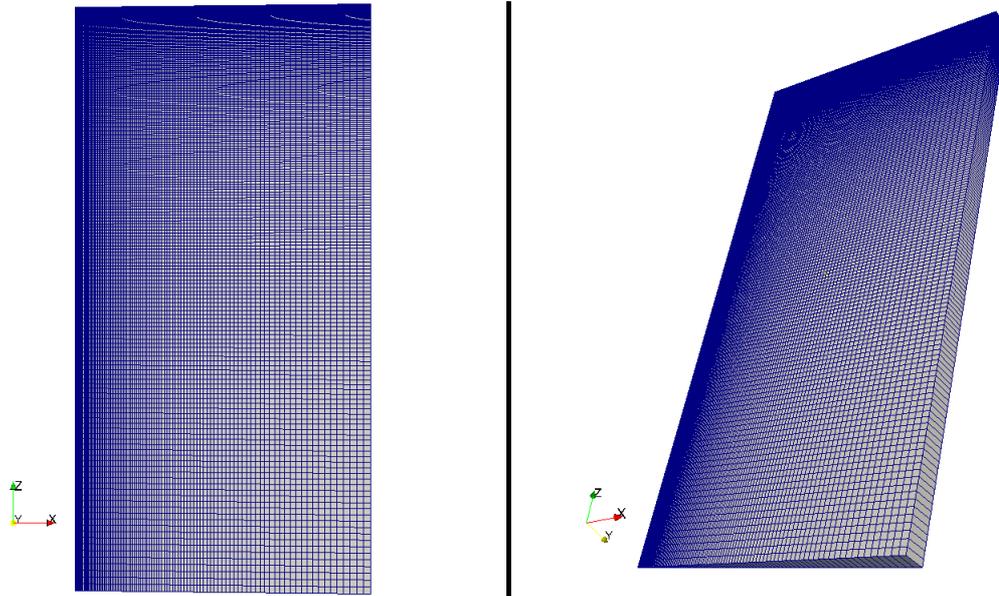


Figura 4.7: Dominio CFD utilizzato per le simulazioni in bomba.

Per quanto riguarda il dominio chimico, esso è rappresentato da un parallelepipedo a base quadrata (figura 4.8), di dimensioni 0.1 m lungo gli assi y e z e 1 m in direzione x : il dominio monodimensionale della mixture fraction Z è quindi sviluppato lungo l'asse x , mentre i termini lungo gli assi y e z non sono risolti dal codice.

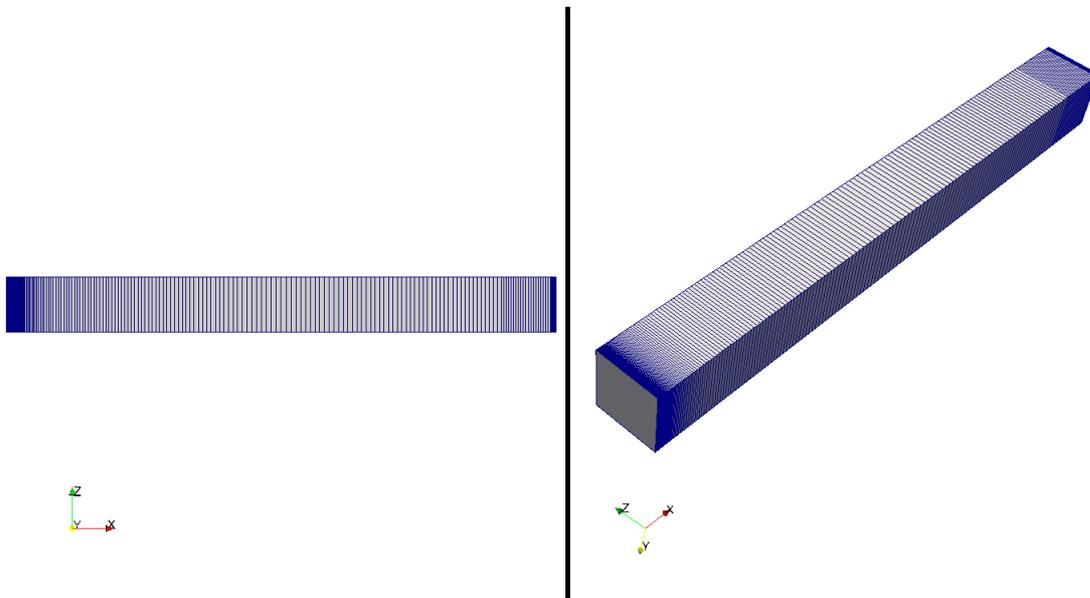


Figura 4.8: Dominio flamelet utilizzato per le simulazioni in bomba.

Il dominio flamelet è stato discretizzato utilizzando 270 celle: la mesh è particolarmente raffinata nella zona che va da $Z=0$ a $Z=0.06$, valore intorno al quale tipicamente si assesta Z_{st} , e nell'intorno di $Z=1$, in modo da garantire una buona risoluzione della soluzione delle equazioni di trasporto nel dominio flamelet e del profilo della β -PDF, particolarmente

impegnativa dal punto di vista numerico nel caso di flamelet giovani caratterizzati da elevati gradienti nell'intorno di $Z=0$ e $Z=1$.

4.5.3 Iniezione di combustibile

Lo spray di combustibile è stata risolto utilizzando un modello lagrangiano, implementato all'interno della *Lib-ICE* e ampiamente validato in [29].

Lo spray è quindi modellato attraverso un numero finito di particelle, ognuna rappresentante un gruppo di gocce di combustibile accomunate da stesse proprietà fisiche: la soluzione delle equazioni di trasporto lagrangiane permette di studiare la traiettoria delle particelle dal nozzle dell'iniettore fino alla completa evaporazione. L'accoppiamento con il dominio euleriano, nel quale si risolve, tra le altre, l'equazione del trasporto della mixture fraction, non si limita unicamente allo scambio di massa da fase liquida (lagrangiano) a fase vapore (euleriano), ma si estende anche allo scambio di quantità di moto tra gocce di combustibile e ossidante, aspetto quanto meno delicato e fortemente dipendente dalla qualità della mesh CFD, e di energia: come è facile aspettarsi, le equazioni di trasporto rivelano lo stretto legame tra dominio lagrangiano e dominio euleriano:

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_e} \quad \frac{dD}{dt} = -\frac{D}{3\tau_e} \quad (4.1)$$

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{m_d}{\tau_b} \quad \frac{dD}{dt} = -\frac{D}{3\tau_b} \quad (4.2)$$

$$m_d \frac{d\vec{u}_d}{dt} = -\frac{\pi D^2}{8} \rho C_d |\vec{u}_d - \vec{u}| (\vec{u}_d - \vec{u}) + m_d \vec{g} \quad (4.3)$$

$$m_d \frac{dh_d}{dt} = \dot{m}_d h_v(T_d) + \pi D \kappa Nu (T - T_d) f \quad (4.4)$$

dove le prime due coppie di equazioni sono per la conservazione della massa, in condizioni di evaporazioni standard la prima e in condizioni di ebollizione la seconda, la terza per la conservazione della quantità di moto e l'ultima per la conservazione dell'energia. Per ulteriori dettagli si rimanda a [30].

Le equazioni di trasporto lagrangiano non permettono però la descrizione completa dei complessi fenomeni che intercorrono durante la formazione, propagazione ed evaporazione dello spray di combustibile: atomizzazione, breakup secondario, drag, evaporazione, scambio termico, collisione e dispersione turbulenta richiedono modelli fenomenologici addizionali.

Le gocce all'uscita dal nozzle hanno diametro comparabile al diametro del foro dell'iniettore e si muovono con velocità che è funzione della legge di iniezione. Il diametro delle gocce si riduce allontanandosi dall'iniettore secondo l'equazione:

$$\frac{dD}{dt} = -C_5 \frac{L_A}{\tau_A} \quad (4.5)$$

dove L_A e τ_A sono rispettivamente la lunghezza di breakup, proporzionale alla scala di lunghezza turbolenta, e il tempo di breakup, combinazione lineare della scala temporale della turbolenza e della scala temporale di crescita delle perturbazioni dovute all'instabilità fluidodinamica di Kelvin-Helmoltz, mentre C_5 è una costante del modello.

Con la progressiva riduzione del diametro inizia a farsi largo il breakup secondario: regolato dal rapporto tra forze inerziali e tensione superficiale, è conseguenza di complesse interazioni tra turbolenza, forze aerodinamiche e superficie delle gocce portando all'instabilità di Kelvin-Helmoltz-Rayleigh-Taylor (KHRT).

All'interno della *Lib-ICE* sono inoltre implementati diversi altri sotto-modelli, per tener conto ad esempio dello scambio termico: si rimanda a [25] per una più dettagliata descrizione e bibliografia.

L'ECN fornisce, parallelamente ai risultati sperimentali, le specifiche tecniche degli iniettori utilizzati durante le campagne sperimentali: data quindi la legge di iniezione è possibile simulare la morfologia dello spray di combustibile.

Il caso Spray H studiato presenta una legge di iniezione, presentata in figura 4.9, con rampe di inizio iniezione e fine iniezione estremamente rapide: questa particolare strategia di iniezione risulta essere un arduo banco di prova per qualsiasi modello di spray, data l'intensa interazione tra aria in quiete e spray ad elevata velocità nei primissimi istanti dopo l'inizio dell'iniezione.

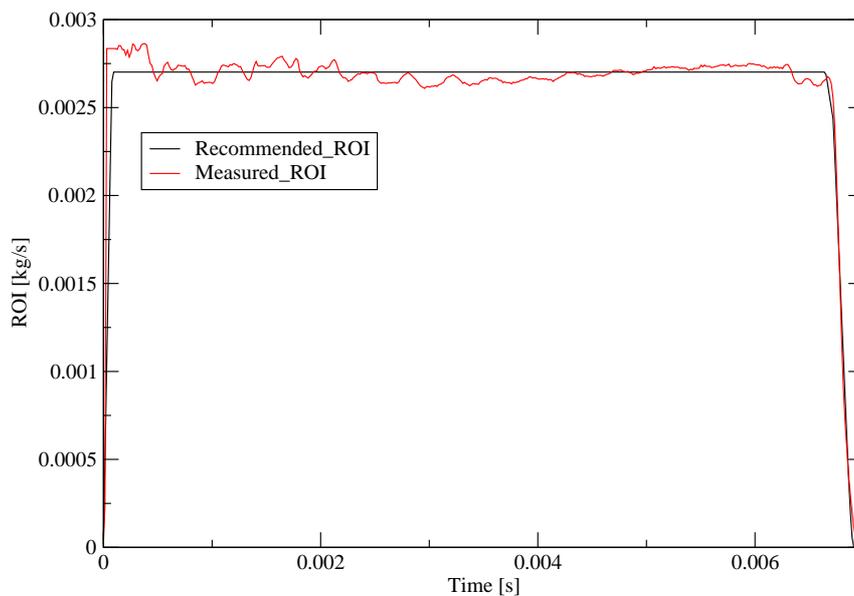


Figura 4.9: Legge di iniezione raccomandata e misurata.

Il combustibile è iniettato con un sistema common rail ad una pressione di iniezione

media durante le prove di 150 MPa da iniettori Bosch di seconda generazione a singolo foro assiale convergente di diametro 0.100 mm e con pozzetto da 0.2 mm³. Sono inoltre assegnati i coefficienti C_d e C_a , definiti a partire dalla velocità media ideale del combustibile U_b

$$U_b = \sqrt{2 \frac{p_{inj} - p_{amb}}{\rho_F}} \quad (4.6)$$

come

$$C_d = \frac{\dot{m}_F}{A_f \rho_F U_b} = 0.80 \quad (4.7)$$

$$C_V = \frac{C_d}{C_a} \quad (4.8)$$

$$C_a = 2 \frac{A_f C_d^2 (p_{inj} - p_{amb})}{\dot{M}_F} = 0.86 \quad (4.9)$$

$$\dot{M}_F = \dot{m}_F C_V U_b \quad (4.10)$$

dove con A_f è indicata l'area del foro dell'iniettore, \dot{m}_F la portata massica di combustibile iniettato, ρ_F la sua densità e con \dot{M}_F il flusso di quantità di moto dello spray di combustibile.

Nonostante la precisa validazione del modello, si è provveduto a verificare il corretto funzionamento nelle condizioni operative della campagna sperimentale spray H: utilizzando il solver `dieselFoamAutoRefine`, solutore non reagente implementato all'interno della *Lib-ICE*, e confrontando i risultati forniti dall'ECN delle prove svolte con percentuale di ossigeno pari allo 0% con i risultati calcolati utilizzando il modello di spray sfruttato anche dal solver `RIFdieselFoam` si può concludere che il modello è adeguato ai fini di stimare con precisione la penetrazione del liquido e dei vapori di combustibile. Si può notare infatti dalla figura 4.10 come i risultati numerici siano in accordo con le rilevazioni sperimentali: come detto in precedenza, la particolare legge di iniezione a rampa implica un'intensa interazione spray-aria soprattutto nei primi istanti dopo l'inizio dell'iniezione, che è non pienamente risolta dal modello di spray utilizzato.

Nonostante questo, il modello è comunque da ritenersi valido riuscendo infatti a conigliere con precisione il valore di penetrazione del liquido e del vapore dopo il primo transitorio.

4.5.4 Solver chimico

La modellazione delle reazioni chimiche implica la risoluzione di un sistema di equazioni alle derivate ordinarie (ODE): la scala temporale delle reazioni chimiche è 2-4 ordini di grandezza inferiore rispetto alla tipica scala temporale fluidodinamica, rendendo necessario l'utilizzo di solver ODE stiff. L'integrazione dei sistemi di equazioni differenziali è stata effettuata utilizzando il solver ODE SIBS (Semi-Implicit Burlish-Stoer) che garantisce stabilità e accuratezza anche nel caso di sistemi stiff.

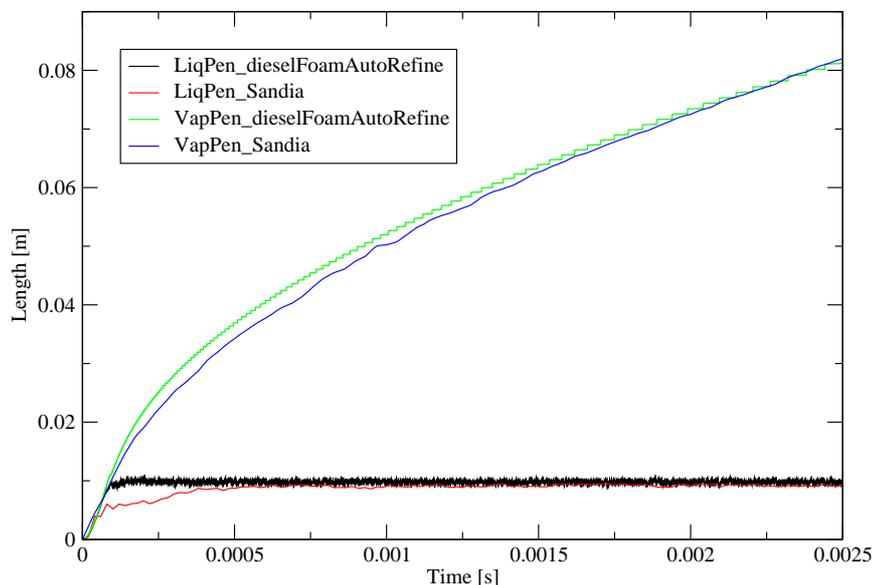


Figura 4.10: Confronto tra lunghezze di penetrazione calcolate e misurate.

L'integrazione diretta di schemi cinetici complessi comporta tuttavia oneri computazionali insostenibili a causa dell'elevato numero di sotto-iterazioni necessarie a soddisfare le tolleranze imposte e al calcolo di jacobiani di grandi dimensioni. La scelta di limitare il numero di specie e di reazioni chimiche degli schemi cinetici riduce l'accuratezza della soluzione qual'ora si vogliano studiare fenomeni di combustione complessa e formazione del particolato. Per rendere possibile l'utilizzo in tempi ragionevoli di schemi cinetici complessi è necessario adottare tecniche di riduzione dei tempi di calcolo alternative.

All'interno della *Lib-ICE* è implementato l'algoritmo TDAC, sviluppato da Contino in collaborazione con il gruppo di Motori a Combustione Interna del Politecnico di Milano, che accoppia al metodo di riduzione delle specie chimiche utilizzate dal meccanismo cinetico DAC (Dynamic Adaptive Chemistry) l'algoritmo ISAT (*in situ* Adaptive Tabulation) che, previa salvataggio runtime delle soluzioni dell'integrazione dei sistemi ODE, riduce i tempi di calcolo riutilizzandole qual'ora possibile. In figura 4.11 è riportata la struttura dell'algoritmo TDAC.

Date le proprietà termodinamiche ψ^q iniziali del sistema ODE, l'algoritmo ISAT ricerca tra le soluzioni precedentemente calcolate una avente condizioni iniziali che, entro date tolleranze, corrispondano alle condizioni iniziale del nuovo sistema: nel caso la ricerca abbia esito positivo si procede con il riutilizzo della soluzione salvata, altrimenti si esegue il calcolo di una nuova soluzione, che entrerà a far parte del database di soluzioni conservate e utilizzate dall'algoritmo ISAT, utilizzando il solver ODE dopo la riduzione del meccanismo

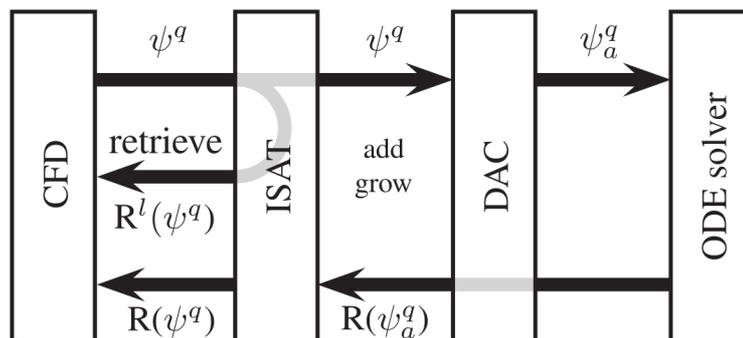


Figura 4.11: Struttura dell'algoritmo TDAC, [31].

cinetico effettuata con il metodo DAC. Per ulteriori dettagli si rimanda a [31] e [32].

4.5.5 Schemi cinetici per la combustione del n-eptano

Vengono ora presentati gli schemi cinetici utilizzati in questo lavoro per la combustione del n-eptano, combustibile surrogato del Diesel stradale impiegato nella campagna sperimentale Spray H.

In questo lavoro sono stati utilizzati principalmente due schemi cinetici ridotti dei meccanismi cinetici dettagliati Curran-Westbrook [33] e Chevalier-Louessard [34], rispettivamente il meccanismo skeletal Lu-Law [35] e il meccanismo skeletal Liu-Pitsch [36], e con minor frequenza lo schema cinetico elaborato dal centro di ricerca Caterpillar. In tabella 4.2 sono riportate le principali caratteristiche dei meccanismi utilizzati estratti dall'output di `OpenSMOKE ChemkinInterpreter`, che elabora e analizza gli schemi cinetici scritti in formato CHEMKIN.

	Lu-Law	Liu-Pitsch	CAT
Number of species	68	44	42
Number of reactions	542	114	168
Irreversible reactions	530	43	0
Equilibrium reactions	12	71	168
Conventional reactions	512	98	153
Third body reactions (total)	30	16	15
Third body reactions	18	12	15
Fall-Off reactions	12	4	0

Tabella 4.2: Tabella riassuntiva degli schemi cinetici per n-eptano.

Nei prossimi paragrafi verranno presentati i risultati delle simulazioni svolte utilizzando i diversi meccanismi cinetici presi in considerazione, evidenziando così le differenze tra essi

e analizzando la sensitività del modello al variare dello schema cinetico.

4.5.6 Analisi dei risultati

Si procede ora con l'analisi dei risultati delle simulazioni sulla campagna sperimentale Spray H: utilizzando i dati sperimentali forniti dall'ECN si è analizzata l'influenza del criterio di inizializzazione dei domini chimici, del numero di flamelet e del meccanismo cinetico utilizzato.

Influenza del meccanismo cinetico

L'analisi di sensitività del modello al meccanismo cinetico di combustione è stata effettuata utilizzando un singolo flamelet: come si vedrà in seguito i modelli mRIF garantiscono una previsione della struttura di fiamma tendenzialmente più accurata del modello RIF con singolo flamelet, ma allo stesso tempo i modelli mRIF non sono adatti ad un'analisi del genere a causa della complessa interazione tra numero di flamelet-turbolenza-chimica-criterio di inizializzazione che confonderebbe i reali effetti della variazione dello schema cinetico.

Il primo aspetto da investigare è in che misura la media del conditional scalar dissipation rate stechiometrico $\widehat{\chi}_{st}$ (abbreviato in ChiStMean da ora) dipenda dal meccanismo cinetico: funzione principalmente della turbolenza in camera e della morfologia dello spray di combustibile, è una delle grandezze principe dei modelli RIF impersonando la turbulence-chemistry interaction.

In figura 4.12 è riportato l'andamento di $\widehat{\chi}_{st}$ per i tre schemi cinetici utilizzati: si può affermare che, nonostante lievi differenze localizzate nei primi istanti dopo il picco di ChiStMean e nella fase finale quando il valore si è ormai stabilizzato, l'andamento di ChiStMean non sia fortemente influenzato dalle variazioni del campo di moto causate dalle differenti leggi di rilascio di calore.

L'influenza del meccanismo cinetico si fa infatti pesante prevalentemente sulla legge di rilascio di calore, sulla curva di pressione e sul ritardo all'accensione, funzioni del grado di avanzamento delle reazioni chimiche e quindi della reattività globale degli schemi cinetici. In figura 4.13 sono riportate le tre curve di pressione calcolate con i tre schemi cinetici presi in considerazione: in questo caso le differenze sono sostanziali, sia in termini di reazioni di bassa temperatura, evidenti solo nel caso di meccanismo cinetico di Lu-Law, che in termini di ignition delay.

Come si può notare in figura 4.14 l'ignition delay, stimabile a partire dall'andamento della derivata temporale della pressione in camera e quindi dalla legge di rilascio di calore, è inferiore nel caso di meccanismo Caterpillar, particolarmente reattivo a basse temperature, ma comunque superiore agli 0.73 ms rilevati sperimentalmente. Si può notare allo stesso tempo che il rilascio di calore nella fase diffusiva è ben rilevato da tutti e tre gli schemi cinetici utilizzati, nonostante il picco di rilascio pesantemente sovrastimato.

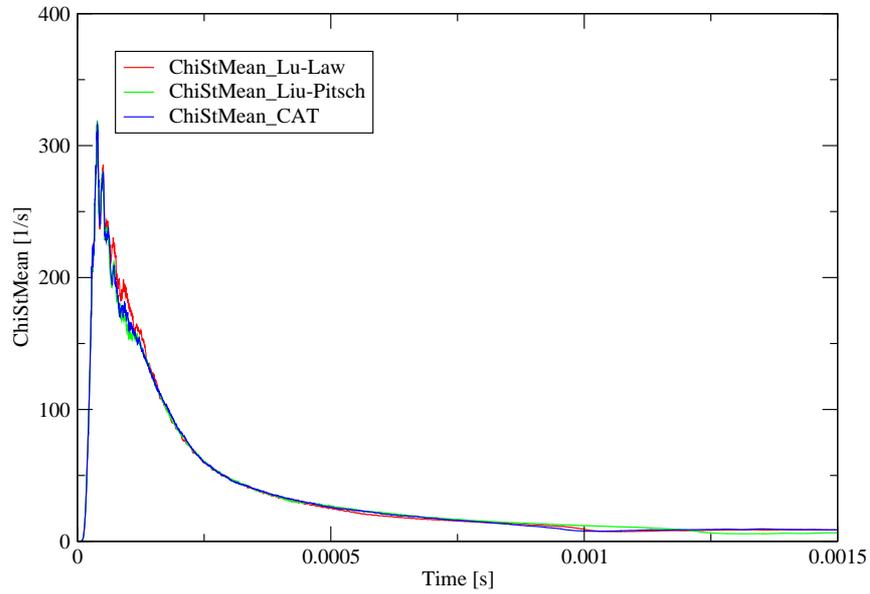


Figura 4.12: Andamento di ChiStMean per i tre meccanismi cinetici utilizzati.

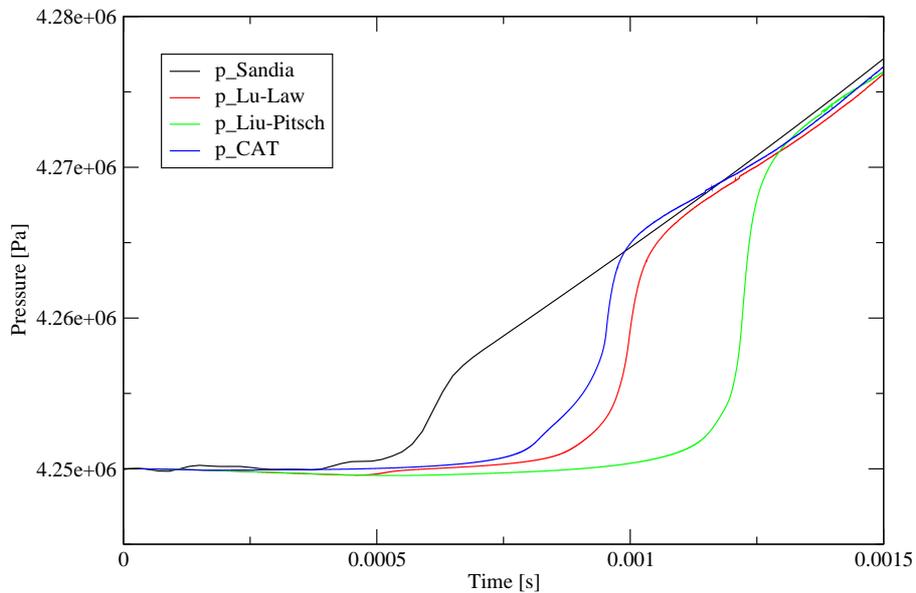


Figura 4.13: Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate.

Passando poi per il confronto con le misurazioni ottiche effettuate in bomba, emergono i limiti del modello singolo flamelet: in figura 4.15 sono riportate le rilevazioni di chemi-

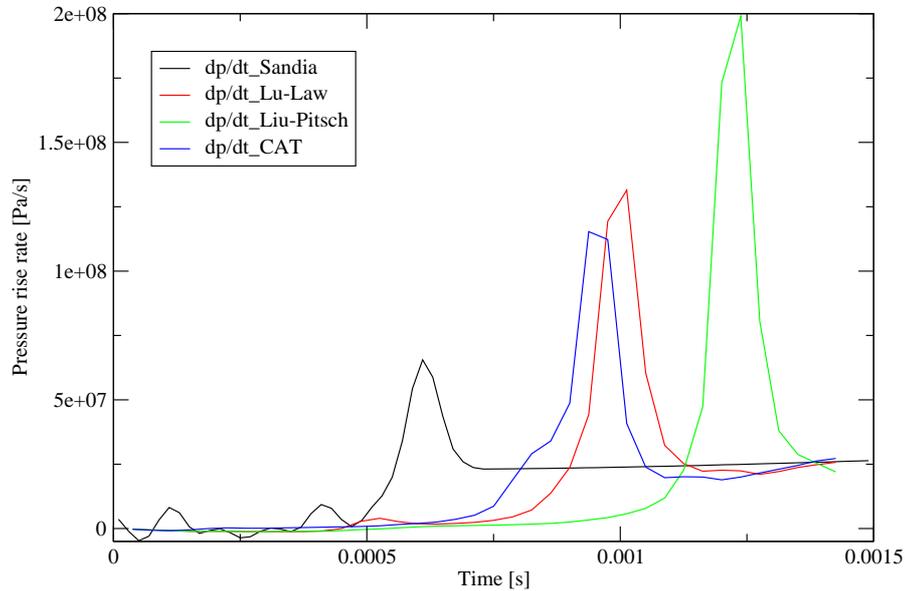


Figura 4.14: Confronto tra pressure rise rate sperimentale e calcolate.

luminescenza, associabili alle reazioni di alta temperatura e alla distribuzione di OH in camera, effettuate dalle finestre ottiche della bomba.

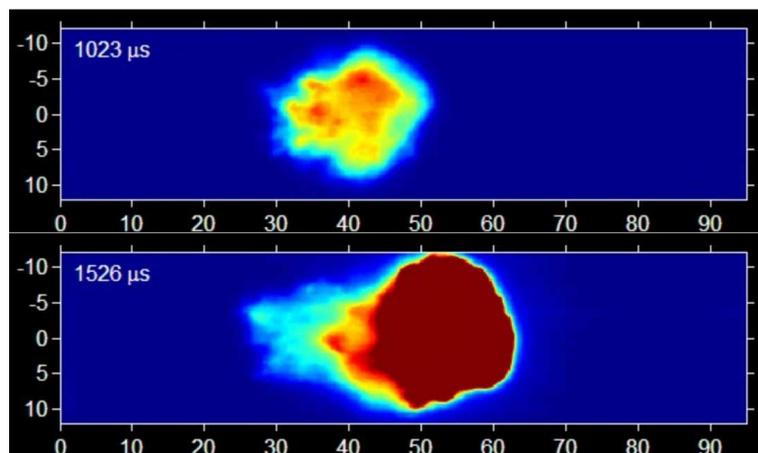


Figura 4.15: Chemiluminescenza a 1 ms e 1.5 ms, [28].

Dalle immagini si possono riscontrare prevalentemente tre zone. La prima zona si estende dal nozzle dell'iniettore fino alla prima zona di reazione ed è caratterizzata dall'assenza completa di chemiluminescenza: l'elevata turbolenza dovuta allo spray di combustibile causa un intenso effetto di quenching, evidenziato dal lift-off della fiamma, valutato in 23.4 mm nelle condizioni operative del caso considerato. A partire dalla lunghezza di lift-off si estende una seconda zona, caratterizzata da un miscela localmente ricca di combustibile,

in cui si sviluppano reazioni di bassa temperatura in regime premiscelato. A valle della regione a bassa temperatura si estende l'ultima zona in cui si sviluppano le reazioni ad alta temperatura in regime diffusivo favorite dal trasporto di massa ed energia dalla regione a monte.

In figura 4.16 e 4.17 sono riportati i campi di temperatura e frazione massica di OH calcolati utilizzando il solver RIFdieselFoam con un singolo flamelet e con i tre meccanismi cinetici a 1 ms e 1.5 ms.

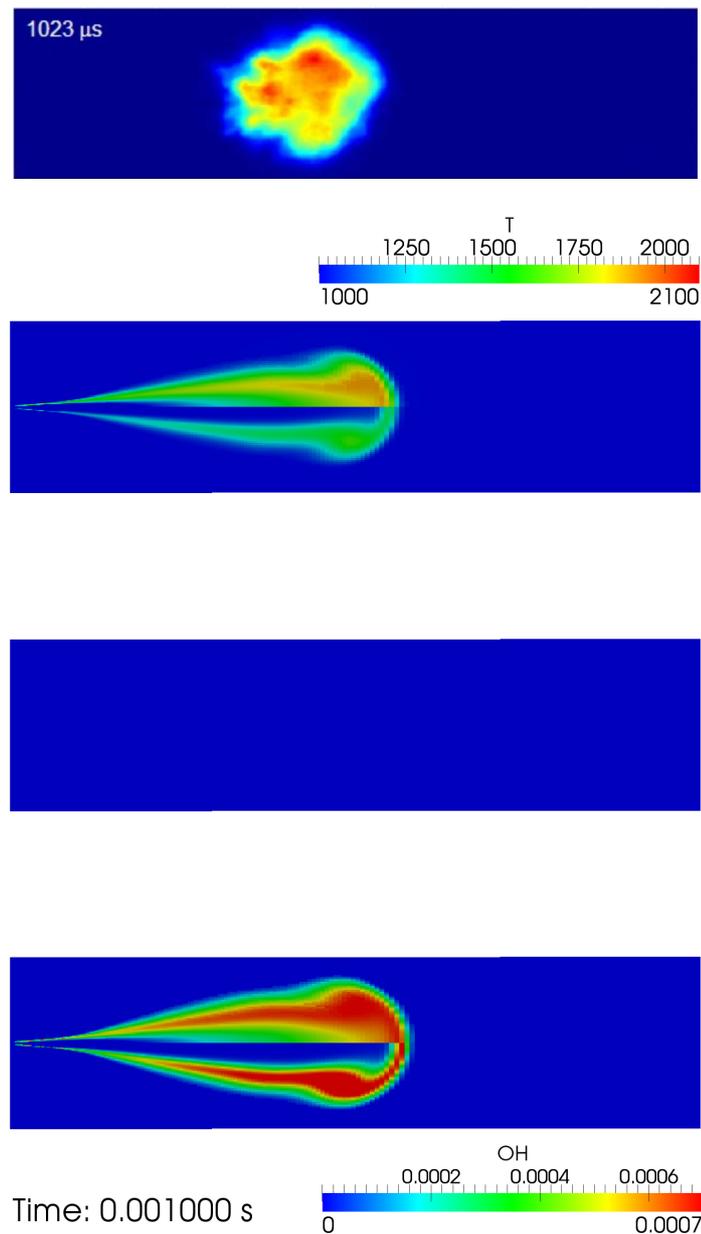


Figura 4.16: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Lu-Law (seconda immagine), Liu-Pitsch (terza immagine) e CAT (quarta immagine).

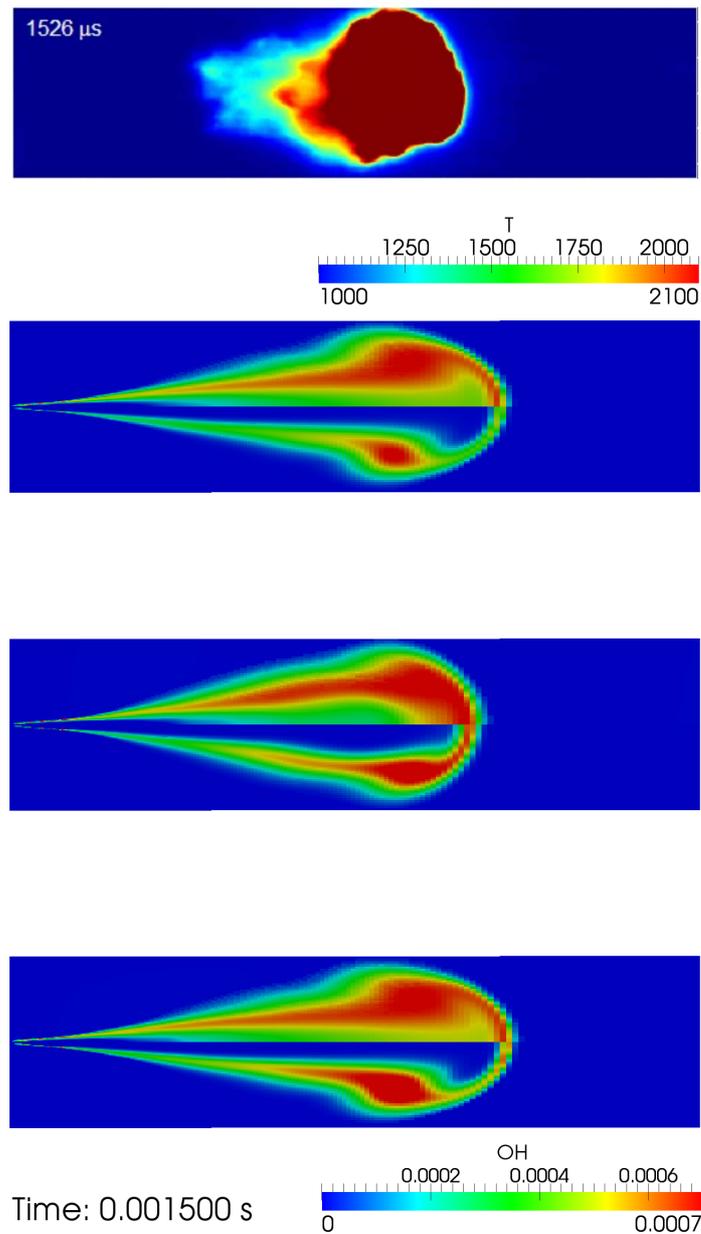


Figura 4.17: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1.5 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Lu-Law (seconda immagine), Liu-Pitsch (terza immagine) e CAT (quarta immagine).

Come era lecito aspettarsi, la maggior reattività del meccanismo cinetico Caterpillar, riscontrata precedentemente nel ritardo all'accensione, si rispecchia in un campo di temperatura e OH fortemente sviluppato già 1 ms dopo l'inizio dell'iniezione.

L'aspetto più interessante da analizzare è però quello legato alla struttura di fiamma: l'utilizzo di un singolo flamelet non permette infatti di cogliere la morfologia tipica di una fiamma Diesel, catturata dalle rilevazioni di chemiluminescenza presentate in figura 4.15.

La fiamma risulta completamente attaccata al nozzle dell'iniettore, non presentando

quindi la prima regione di lift-off causata dall'intensa interazione tra chimica e turbolenza, tradotta in valori di $\tilde{\chi}$ elevati. La causa è da cercarsi nella mancata distinzione nel dominio chimico delle diverse condizioni di avanzamento delle reazioni, causando quindi l'accensione di zone dove l'effetto di quenching turbolento dovrebbe estinguere la fiamma. La β -PDF, cui principale funzione è la corretta trasposizione della soluzione delle equazioni di governo dal dominio chimico al dominio fisico, non è quindi sufficiente qualora l'intera massa di combustibile e di prodotti derivanti dal combustibile siano rappresentati da un solo flamelet, o ancora meglio, da un numero adeguato di flamelet.

Il posizionamento della regione diffusiva in testa alla fiamma, influenzato fortemente dalla penetrazione del vapore, è comunque colto con precisione da tutti i meccanismi cinetici utilizzati, confermando la bontà del modello di spray e del RIF in regime diffusivo.

Utilizzando il solver `flameletFoam` si è poi investigato l'effetto del $\widehat{\chi}_{st}$ sulla soluzione delle equazioni di governo nel dominio flamelet: questo solver, implementato all'interno della *Lib-ICE*, risolve le equazioni caratteristiche del dominio chimico imposto l'andamento temporale di $\widehat{\chi}_{st}$.

Seguendo l'approccio proposto in [8], si è scelto di utilizzare un profilo a gradino per $\widehat{\chi}_{st}$: inizialmente lo scalar dissipation rate medio stechiometrico è posto elevato in modo da inibire le reazioni ad elevata temperatura per il primo millisecondo, per scalare al secondo valore di $\widehat{\chi}_{st}$, mantenuto costante fino alla fine della simulazione. Vista la diversa reattività degli schemi cinetici utilizzati in quest'analisi (Lu-Law e Liu-Pitsch), è stato necessario imporre due diversi valori di `ChiStMean` per la prima fase in modo da garantire indicativamente lo stesso grado di avanzamento all'inizio della seconda fase: note le condizioni termodinamiche iniziali, identiche al caso in bomba studiato, si è scelto di imporre $\widehat{\chi}_{st}$ pari a 50 1/s per i casi con schema cinetico Lu-Law e 25 1/s per il Liu-Pitsch. In figura 4.18 è riportante, a titolo esemplificativo, uno dei profili di `ChiStMean` utilizzato per i casi con il meccanismo cinetico di Lu-Law.

Facendo variare il secondo livello di `ChiStMean`, si è analizzata l'influenza sul ritardo all'accensione e più in generale sull'evoluzione temporale del grado di avanzamento delle reazioni: seguendo ancora una volta l'approccio proposto da Barths in [8] il ritardo all'accensione è stato valutato come l'intervallo di tempo che intercorre dal passaggio al secondo livello di `ChiStMean` all'istante in cui la massima temperatura nel dominio Z raggiunge i 1500 K.

In figura 4.19 sono riportati gli andamenti del ritardo all'accensione in funzione dello scalar dissipation rate stechiometrico medio per i due meccanismi cinetici considerati: la maggior reattività dello schema Lu-Law è confermata anche da questa analisi, con l'interessante osservazione che esistono livelli di $\widehat{\chi}_{st}$ che permettono il procedere delle reazioni ad alta temperatura per lo schema Lu-Law ma non per lo schema Liu-Pitsch. Le curve presentano infatti un andamento asintotico, causato dall'effetto di $\chi(Z, t)$, e quindi di $\widehat{\chi}_{st}$, sulla soluzione delle equazioni di trasporto nel dominio Z . I prodotti di reazione e la potenza termica rilasciata dalle reazioni di bassa temperatura diffondono rapidamente a causa dell'elevato

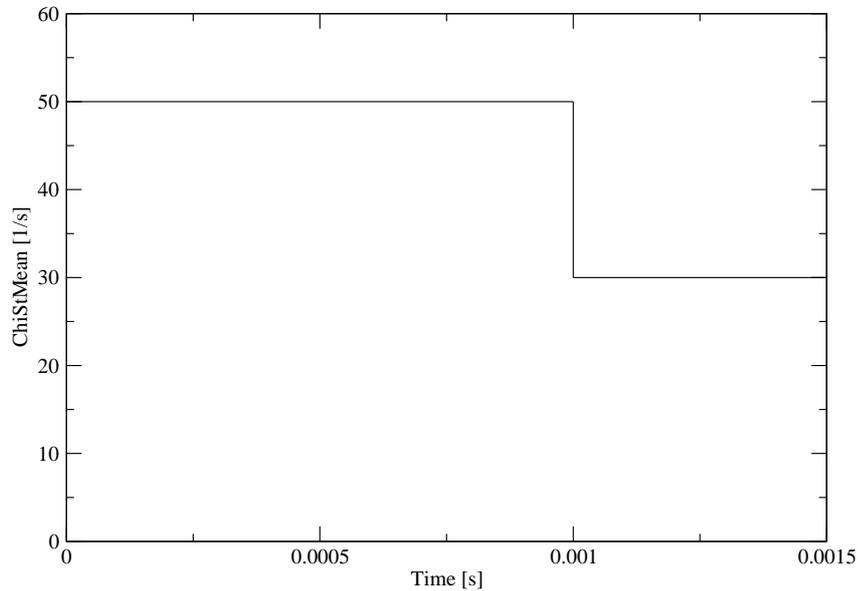


Figura 4.18: Andamento a gradino di ChiStMean utilizzato in uno dei casi studiati, con primo livello posto pari a 50 e secondo pari a 30.

scalar dissipation rate, impedendo così l'innalzamento progressivo della concentrazione di radicali altamente reattivi e temperatura tipico delle reazioni a catena. Si può notare infine che l'asintoto orizzontale, pari al minimo ignition delay raggiungibile, è praticamente comune ad entrambi gli schemi cinetici: si può quindi affermare che, qual'ora lo scambio diffusivo causato dallo scalar dissipation rate sia basso, la velocità di avanzamento delle reazioni di medio-bassa temperatura per i due schemi cinetici sia praticamente equivalente, evidenziando così la probabile causa della minor reattività globale dello schema cinetico Liu-Pitsch, cioè una maggior sensibilità alle basse temperature, causato probabilmente da un'eccessiva riduzione della libreria delle reazioni di bassa temperatura.

Ulteriori spunti di riflessione provengono dall'analisi dei profili di temperatura massima nel dominio flamelet al variare del secondo livello di ChiStMean ricavati ancora una volta grazie al solver `flameletFoam`. In figura 4.20 e 4.21 sono riportati le temperature massime nel dominio Z per i due meccanismi cinetici utilizzati parametrizzate in funzione del secondo livello di ChiStMean imposto.

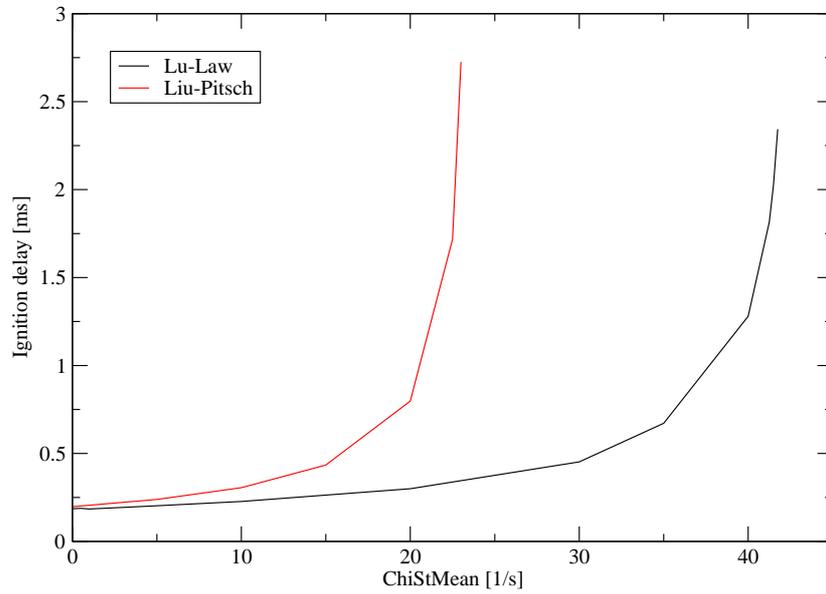


Figura 4.19: Ignition delay in funzione del ChiStMean.

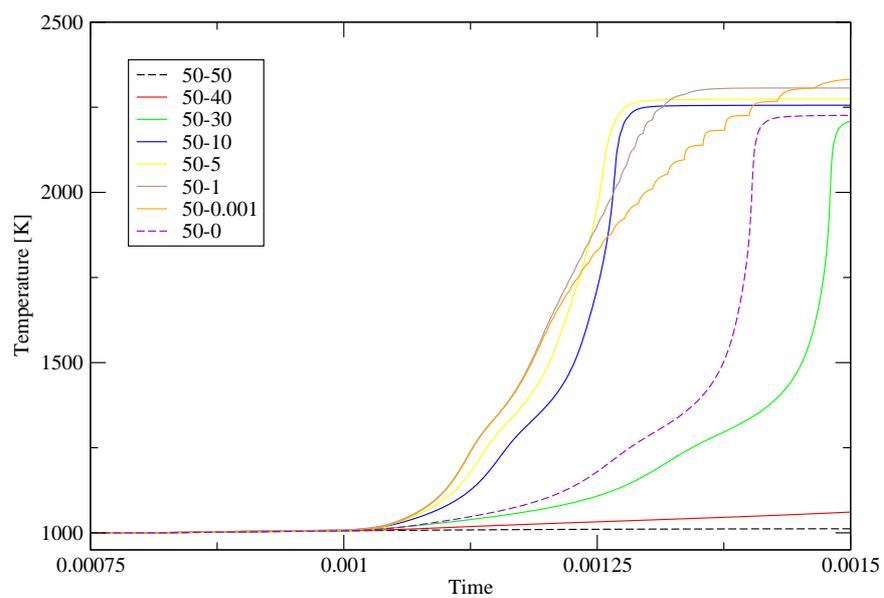


Figura 4.20: Temperatura massima nel dominio Z per lo schema cinetico Lu-Law.

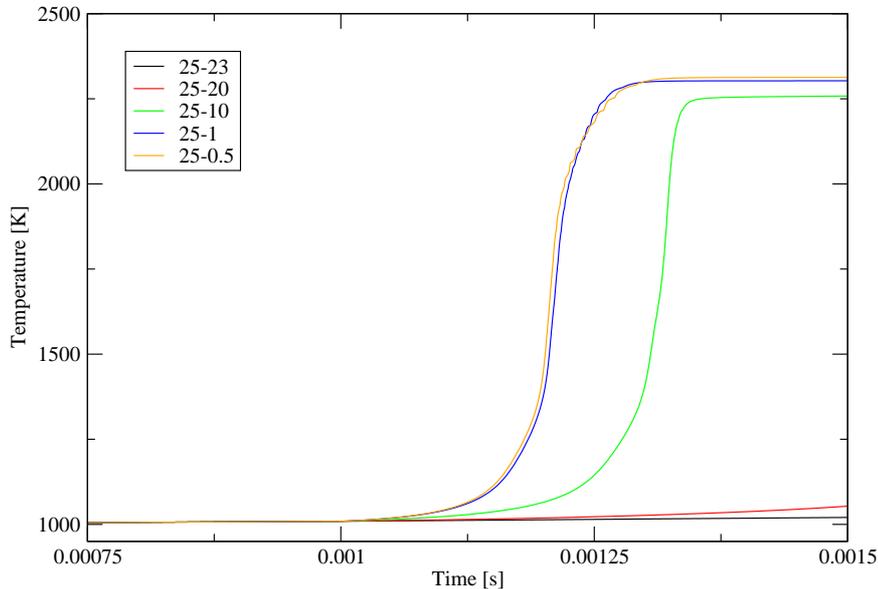


Figura 4.21: Temperatura massima nel dominio Z per lo schema cinetico Liu-Pitsch.

In particolare, dall'analisi dei casi con schema cinetico Lu-Law, possono essere tratte interessanti considerazioni sull'effetto di $\widehat{\chi}_{st}$ sulla soluzione delle equazioni di trasporto nel dominio flamelet, che non dipendono direttamente dal meccanismo cinetico utilizzato e quindi estendibili anche ai casi con meccanismo cinetico Liu-Pitsch.

Come già detto in precedenza, la variazione del secondo livello di ChiStMean influisce direttamente sul ritardo all'accensione: l'ignition delay è sì proporzionale allo scalar dissipation rate, con un'interessante eccezione, il caso in cui il secondo livello di scalar dissipation rate stechiometrico medio è imposto pari a 0.

Un'altra interessante osservazione è che anche la temperatura massima raggiunta all'equilibrio dipende direttamente dal secondo livello di $\widehat{\chi}_{st}$, ancora una volta con l'eccezione del caso con ChiStMean pari a 0 dopo il primo millisecondo.

Analizzando poi il tempo necessario a raggiungere la condizione di equilibrio si può trovare la spiegazione alle due anomalie riscontrate in precedenza: si può notare infatti che la riduzione del $\widehat{\chi}_{st}$ comporta una riduzione del tempo necessario a raggiungere la condizione di equilibrio, fino a un valore di ChiStMean compreso tra 5 e 1 al di sotto del quale la riduzione del livello di scalar dissipation rate corrisponde un aumento di questo intervallo temporale. Si può concludere quindi che l'effetto diffusivo dello scalar dissipation rate ha un duplice effetto sull'evoluzione delle reazioni chimiche nel dominio flamelet: da una parte lo scambio di energia e specie chimiche al di fuori dell'intervallo di Z reagente comporta una riduzione delle velocità di reazione rilevabili in ritardi all'accensione superiore e temperature massime inferiori, ma allo stesso tempo l'effetto locale legato all'innalzamento di

temperatura e concentrazioni di prodotti intermedi nell'intorno della regione stechiometrica può, qual'ora $\widehat{\chi}_{st}$ non sia elevato, comportare l'innalzamento delle velocità di reazioni e il raggiungimento di condizioni all'equilibrio caratterizzate da livelli di conversione maggiori.

Influenza del numero di flamelet e criterio di inizializzazione

Si passa ora ad analizzare l'influenza del numero di flamelet e del criterio di inizializzazione: come detto in precedenza, la struttura di fiamma non è risolvibile utilizzando un solo flamelet. L'impiego di più flamelet permette invece di prevedere correttamente la stabilizzazione della fiamma e il lift-off.

Si presentano ora i risultati delle simulazioni basate sul caso Spray H utilizzato in precedenza per lo studio dell'influenza del meccanismo cinetico, effettuate con il meccanismo cinetico Lu-Law con 5, 15 e 45 flamelet sia con criterio di inizializzazione Clone che NoClone.

In figura 4.22 sono riportati gli andamenti della temperatura massima nei domini flamelet nei caso Clone e NoClone 5 flamelet, dai quali si può immediatamente intuire come il diverso criterio di inizializzazione influisca sull'avanzamento delle reazioni nei diversi domini chimici.

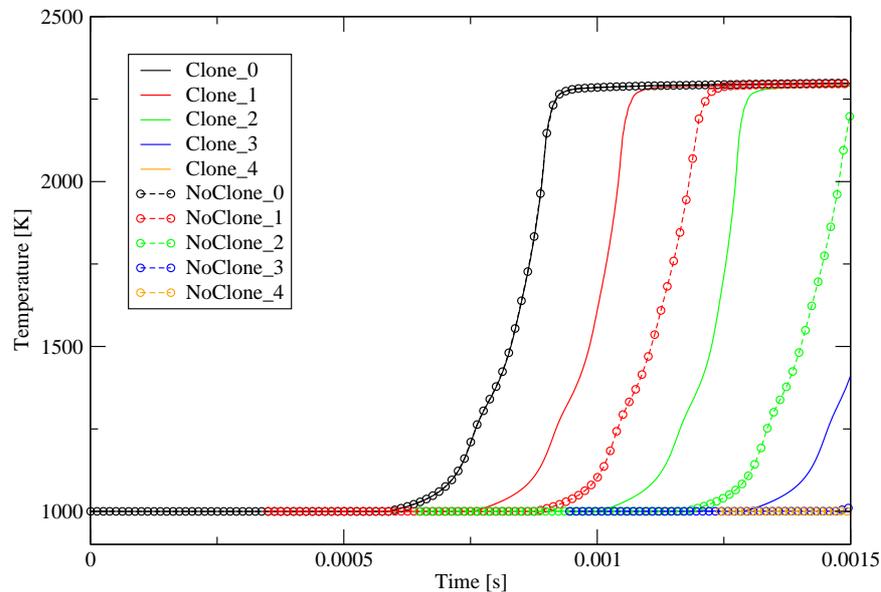


Figura 4.22: Temperatura massima nel dominio Z nei casi Clone e NoClone 5 flamelet.

In figura 4.23, 4.24, 4.25 4.26 sono riportati i campi di temperatura e OH a 1 ms e 1.5 ms con 5, 15 e 45 flamelet utilizzando il criterio di inizializzazione Clone (prima coppia) e NoClone (seconda coppia).

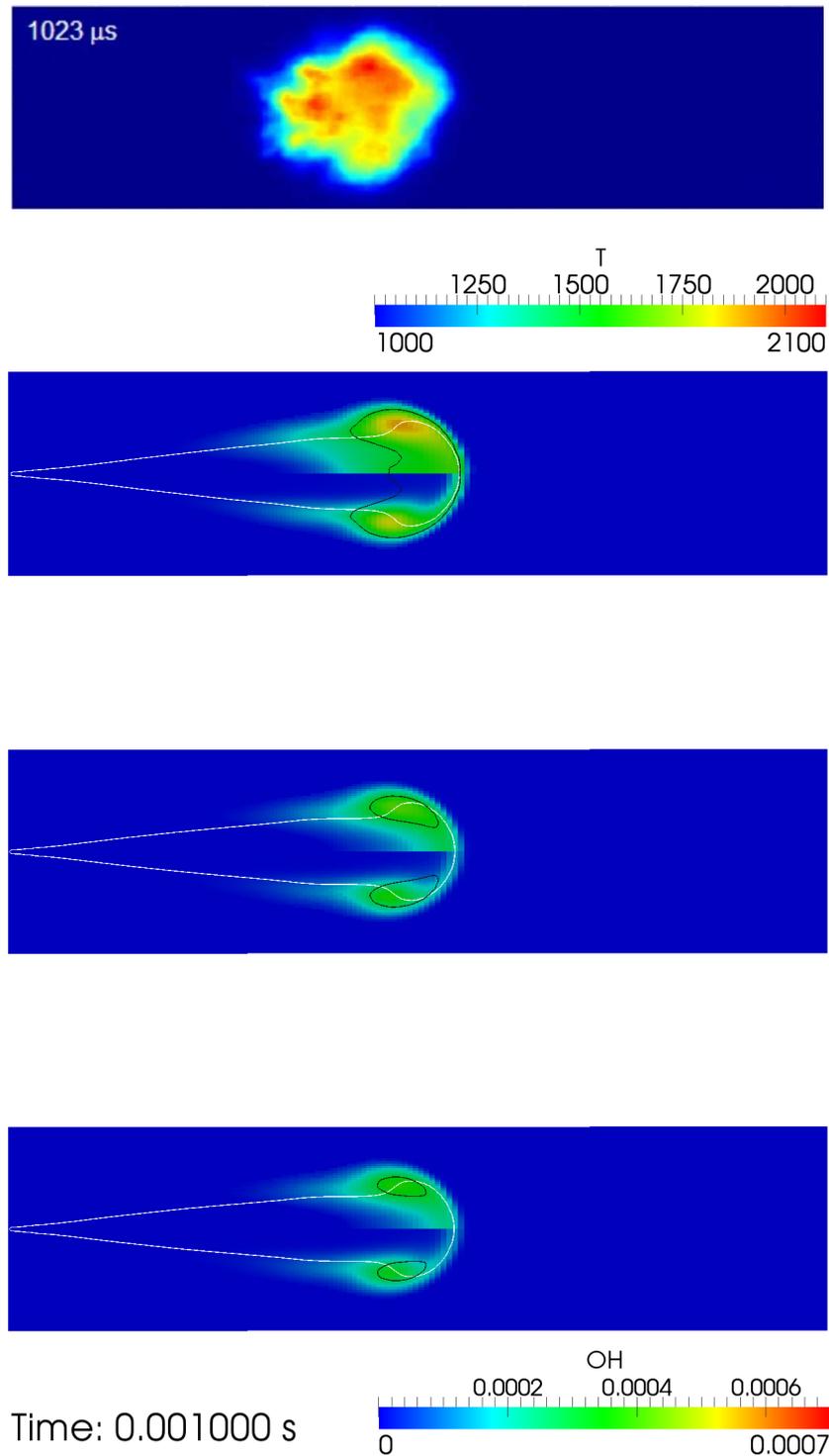


Figura 4.23: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1 ms calcolati utilizzando il criterio di inizializzazione Clone con 5 flamelet (seconda immagine), 15 flamelet (terza immagine) e 45 flamelet (quarta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

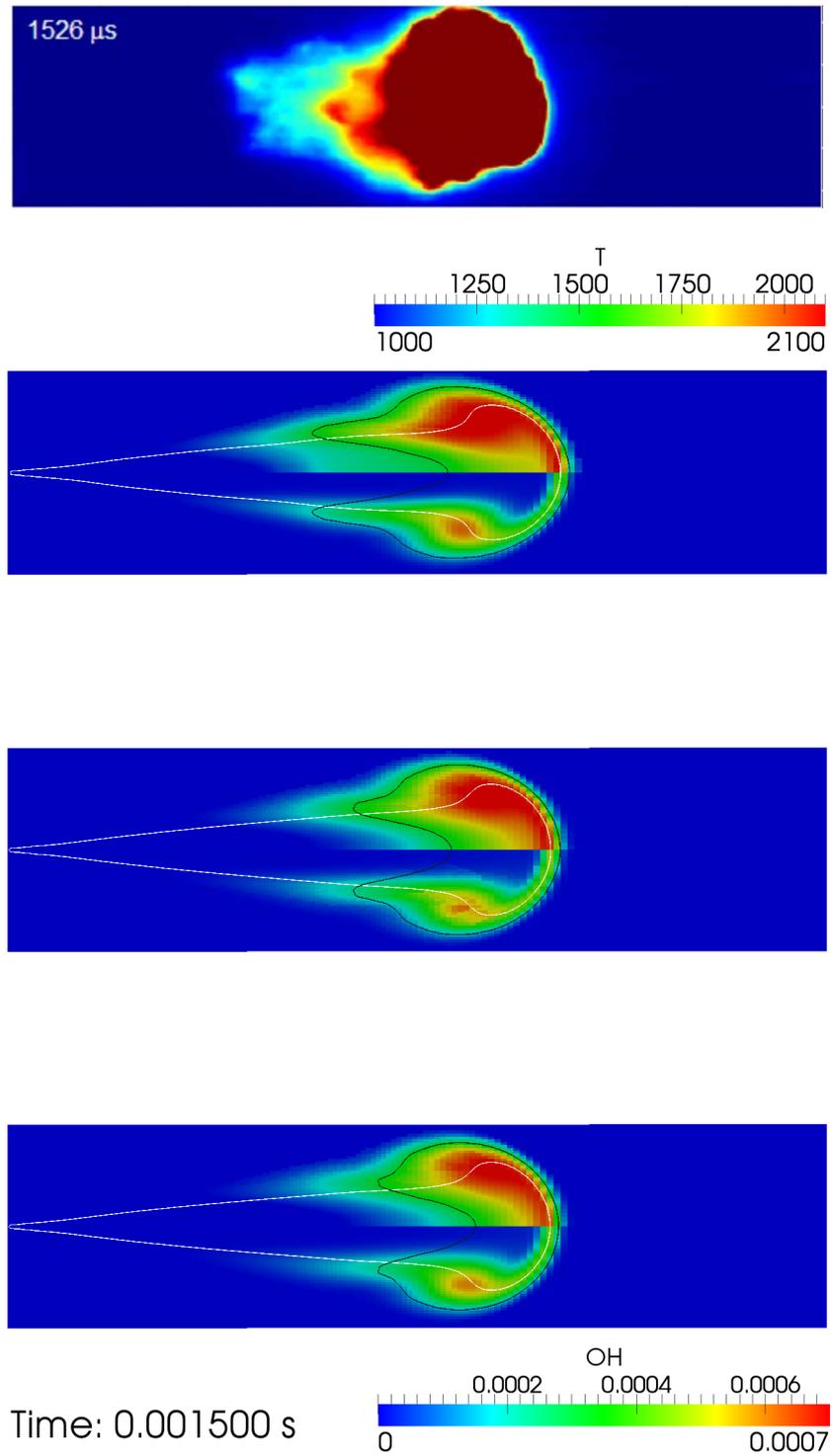


Figura 4.24: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1.5 ms calcolati utilizzando il criterio di inizializzazione Clone con 5 flamelet (seconda immagine), 15 flamelet (terza immagine) e 45 flamelet (quarta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

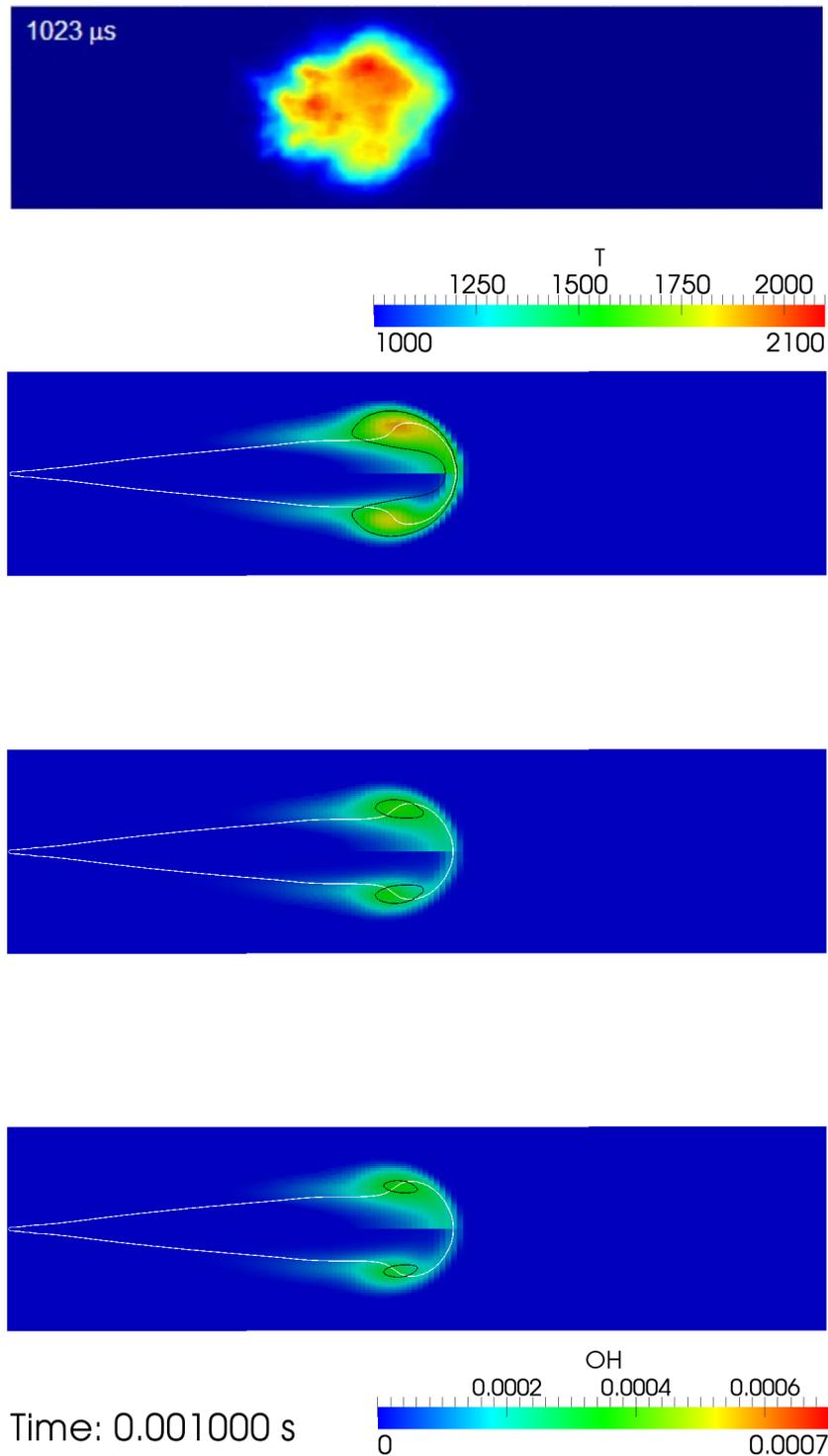


Figura 4.25: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1 ms calcolati utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone con 5 flamelet (seconda immagine), 15 flamelet (terza immagine) e 45 flamelet (quarta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolina nera unisce i punti a 1500 K.

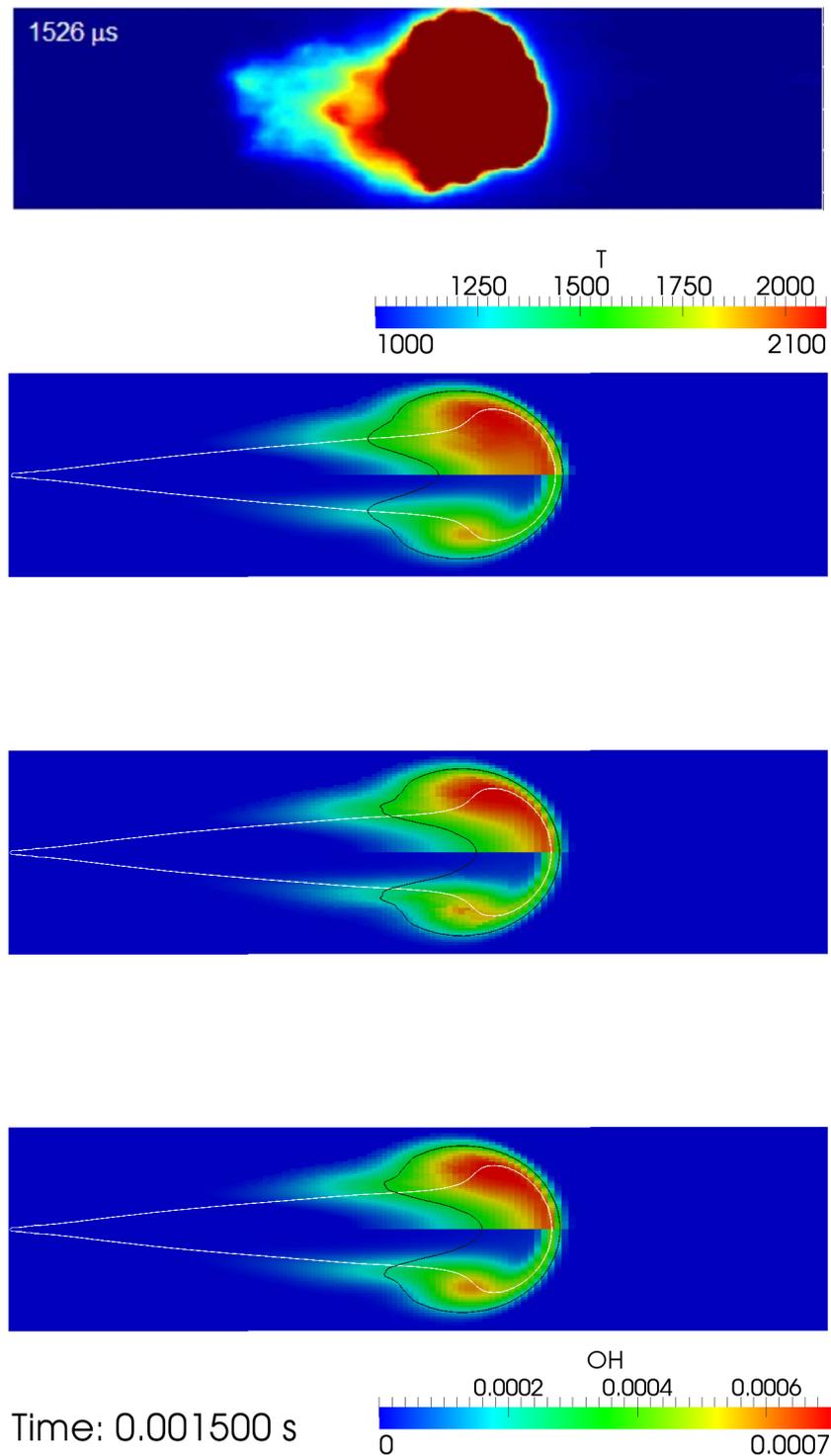


Figura 4.26: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1.5 ms calcolati utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone con 5 flamelet (seconda immagine), 15 flamelet (terza immagine) e 45 flamelet (quarta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

La struttura di fiamma appare completamente rivoluzionata rispetto ai casi con singolo flamelet: salta all'occhio immediatamente la presenza della regione di lift-off, assente nei campi presentati in figura 4.16 e 4.17, mantenendo inalterata la capacità di previsione del posizionamento della regione diffusiva in testa alla fiamma.

Il numero di flamelet influenza, sia nel caso di criterio di inizializzazione Clone che in quello NoClone, prevalentemente il fenomeno di accensione, come si può intuire dalla differenze in termini di sviluppo delle reazioni a medio-bassa temperatura rilevabili tramite l'isolinea a 1500 K a 1 ms, e la regione premiscelata a valle del lift-off, soprattutto nei casi Clone.

Per quanto riguarda il confronto tra criteri di inizializzazione, è interessante notare che le differenze, legate in particolar modo alla fase di accensione, allo sviluppo radiale della regione diffusiva e assiale di quella premiscelata, tendono a smorzarsi con l'aumentare del numero di flamelet: un numero di flamelet maggiore implica la riduzione dell'intervallo di tempo tra la generazione di un flamelet e l'altro, portando così ad avere soluzioni nel dominio Z da clonare poco sviluppate rispetto alla soluzione di pure mixing, e riducendo quindi la distanza tra le due soluzioni, sia nel dominio chimico che in quello fisico.

In figura 4.27 sono riportate le lunghezze di lift-off, valutate come minima distanza dall'iniettore in cui si raggiunge il 2% del valore massimo di \tilde{Y}_{OH} , confrontate con il valore sperimentale misurato in bomba.

Ancora una volta si ripropone la convergenza verso un'unica soluzione all'aumentare del numero di flamelet: va notato anche che i risultati con un numero basso di flamelet (5 nel nostro caso) presentano comunque un buon grado di accuratezza.

In figura 4.28 è riportato il confronto tra la curva di pressione sperimentale e le curve calcolate sia con criterio di inizializzazione Clone che con quello NoClone utilizzando 15 e 45 flamelet. Le curve non presentano né gli effetti delle reazioni iniziali di fiamma fredda né il picco di rilascio di calore legato alla prima fase di accensione premiscelata. La spiegazione è da ricercarsi nella contemporanea presenza di flamelet con differenti stati di avanzamento, soprattutto nelle fasi iniziali: la cosa è positiva in termini di previsione della struttura di fiamma, ma allo stesso tempo si ripercuote negativamente sulla previsione del rilascio di calore durante le fasi di bassa temperatura, già non particolarmente esasperate dai meccanismi cinetici utilizzati, e la conseguente fase di combustione premiscelata.

Dal confronto delle curve di pressione ottenute con il criterio di inizializzazione Clone, presentato in figura 4.29, si può notare che:

- l'utilizzo di un basso numero di flamelet (5 nel nostro caso) porta alla formazione di oscillazioni sulla curva di pressione, a causa dell'accensione in sequenza dei diversi domini chimici, e alla presenza del picco di rilascio di calore dovuto alla fase di accensione premiscelata, praticamente assente con un numero elevato di flamelet
- la differenza in termini di pendenza delle curve di pressione con 15 e 45 flamelet, e quindi di legge di rilascio del calore, è rilevante ed è legato sostanzialmente allo stato

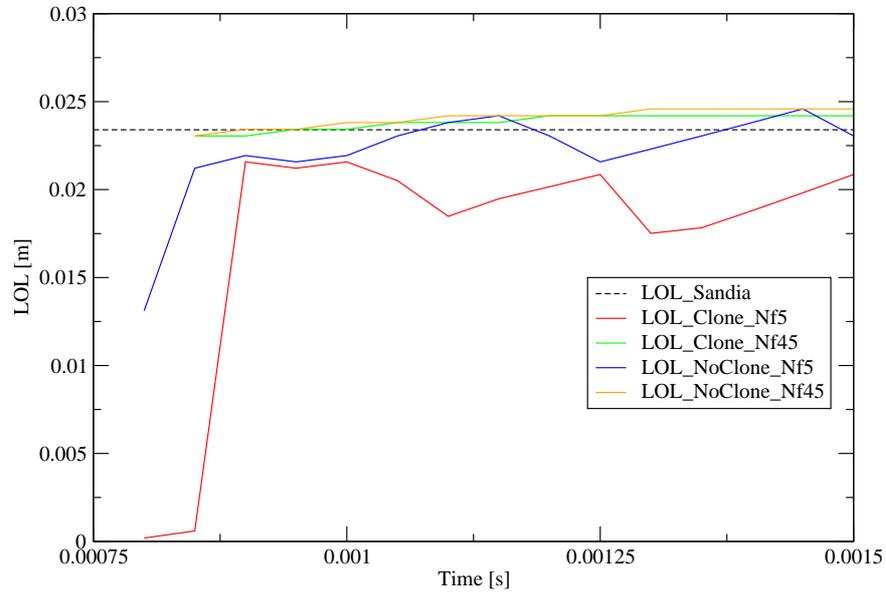


Figura 4.27: Confronto tra Lift-Off Length sperimentale e calcolate con 5 e 45 flamelet e criteri di inizializzazione Clone e NoClone.

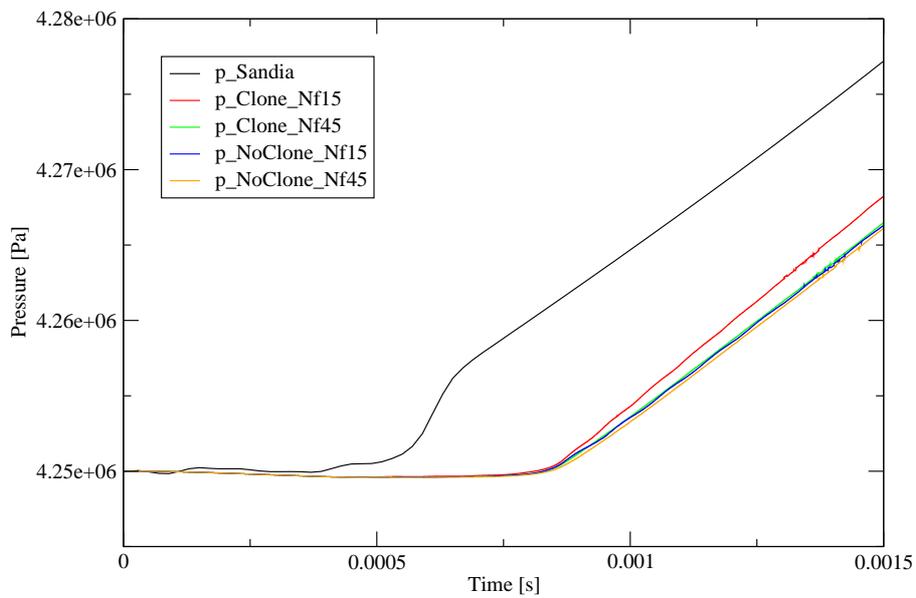


Figura 4.28: Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate con 15 e 45 flamelet e criteri di inizializzazione Clone e NoClone.

di avanzamento dei nuovi domini chimici al momento della loro generazione

- l'utilizzo di un elevato numero di flamelet (45 in questo caso) permette di stimare con precisione la legge di rilascio del calore in regime diffusivo

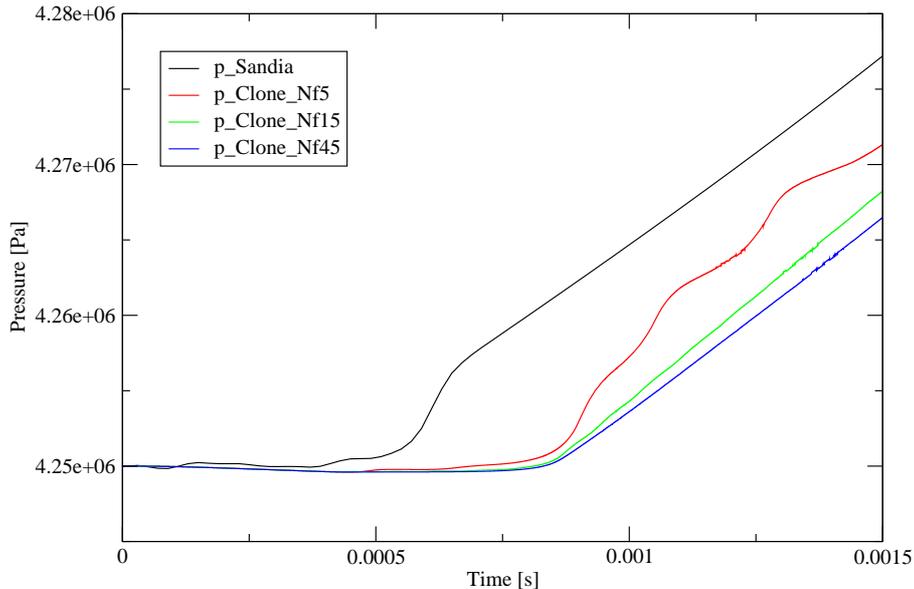


Figura 4.29: Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate con 5, 15 e 45 flamelet e criterio di inizializzazione Clone.

Confrontando invece le curve di pressione ottenute con il criterio di inizializzazione NoClone, in figura 4.30, si può affermare che:

- l'utilizzo di un basso numero di flamelet (ancora una volta 5) porta sì alla formazioni di oscillazioni sulla curva di pressione, a causa dell'accensione in sequenza dei diversi domini chimici, ma non presenta il picco di rilascio del calore rilevabile con criterio di inizializzazione Clone, poichè l'inizializzazione con la soluzione di pure mixing (imponendo quindi un avanzamento delle reazioni chimiche nullo al momento della generazione) ne impedisce la formazione
- la differenza in termini di pendenza delle curve di pressione con 15 e 45 flamelet è inferiore rispetto al Clone, dal momento che i nuovi flamelet vengono generati comunque con profili iniziali di entalpia e specie chimiche di pure mixing, identici quindi a meno delle correzioni legate alla temperatura effettiva dell'incombusto

Si può quindi concludere che l'utilizzo del modello EPFM permette di cogliere con precisione importanti particolari della struttura di fiamma, lift-off e zona di reazione diffusiva

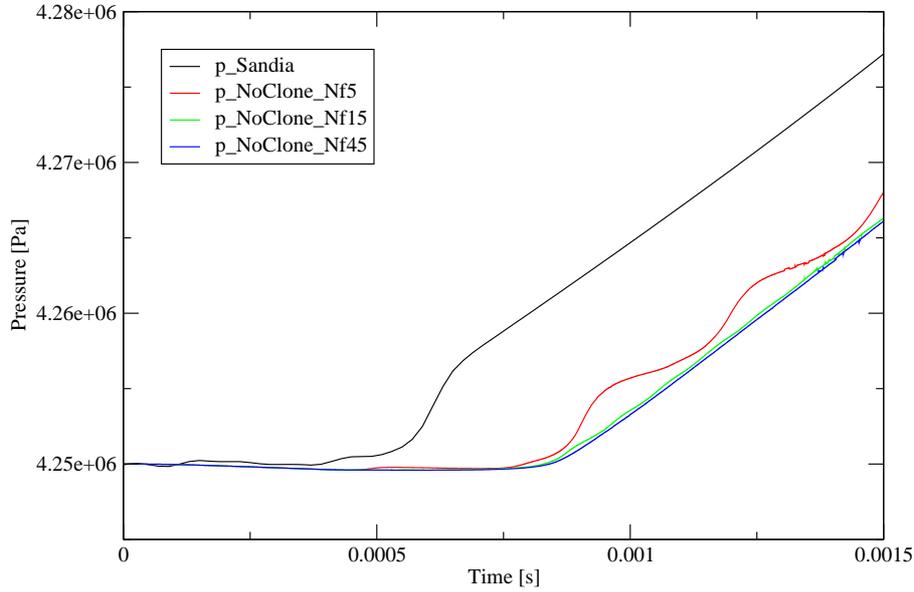


Figura 4.30: Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate con 5, 15 e 45 flamelet e criterio di inizializzazione NoClone.

in primis, essenziali per una corretta previsione della formazione degli inquinanti, legata sostanzialmente a fenomeni e condizioni termodinamiche locali. La curva di pressione non presenta, quando il numero di flamelet è abbastanza elevato, il picco di rilascio di calore all'accensione, rilevabile e sovrastimato nel caso di flamelet singolo, ma la previsione del tasso di rilascio di calore in regime diffusivo è comunque accurata.

In Appendice A è riportata l'analisi di sensitività del modello RIF alle variazioni dell'evoluzione di $\widehat{\chi}_{st}$, del campo di \widetilde{Z}''^2 e della β -PDF: questo tipo di analisi permette di investigare a fondo il principio di funzionamento del modello RIF e comprendere quali siano effettivamente le grandezze che influenzano in maggior misura le soluzioni ottenute con questo modello.

Capitolo 5

La campagna sperimentale Spray A

In questo capitolo verranno presentati i risultati e gli sviluppi del modello nati dal confronto con le misure effettuate sulle prove della campagna sperimentale Spray A: come per le simulazioni sulla campagna sperimentale Spray H, si è scelta una prova sperimentale e si è verificato il comportamento del modello al variare del setup del caso.

Nella prima parte del capitolo verrà proposto il confronto tra risultati delle simulazioni e delle prove sperimentali, analizzando le differenze tra i risultati delle simulazioni svolte con i criteri di suddivisione basati sulla massa di combustibile iniettato e la varianza dello scalar dissipation rate, del numero di flamelet e del meccanismo cinetico utilizzato, per poi passare alla presentazione di tre tecniche sviluppate e implementate in questo lavoro atte a ridurre i tempi di calcolo delle simulazioni con flamelet multipli.

5.1 Analisi basata sulla campagna sperimentale Spray A

Riprendendo la struttura utilizzata nel capitolo precedente, vengono ora presentati i risultati delle simulazioni basate sulla campagna sperimentale Spray A. Dopo aver descritto le condizioni operative e il setup del caso, verrà proposto il confronto con le rilevazioni sperimentali, analizzando le differenze e investigandone le cause.

5.1.1 Condizioni termodinamiche

Come già detto in precedenza, il combustibile surrogato del Diesel stradale utilizzato per la campagna sperimentale Spray A è il normal-dodecano. Come il normal-eptano, anche il normal-dodecano è una paraffina lineare formata da uno scheletro di 12 atomi di carbonio con caratteristiche chimico-fisiche simili al Diesel stradale.

La percentuale di ossigeno iniziale nella miscela ossidante all'interno del reattore è la stessa del caso Spray H studiato nel capitolo precedente (15% molare), mentre la temperatura al SOI è di 900 K e la pressione è pari a 5.98 MPa, a cui corrisponde una densità nominale di 22.8 kg/m^3 e un fattore di comprimibilità di 1.015.

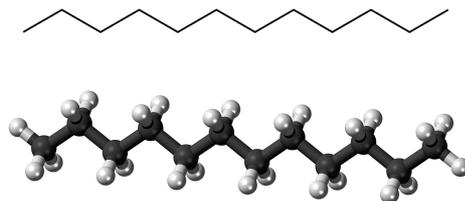


Figura 5.1: Formula di struttura e geometria del n-dodecano.

5.1.2 Mesh

Per quanto riguarda le mesh utilizzate in quest'analisi, non sono state apportate modifiche rispetto alla situazione presentata per le prove sulla campagna sperimentale Spray H, né a quella rappresentante il dominio fisico né quella rappresentante i domini flamelet.

5.1.3 Iniezione di combustibile

Lo spray di combustibile iniettato è stato simulato utilizzando gli stessi modelli presentati nel capitolo precedente per lo spray di n-eptano della campagna sperimentale Spray H.

La prova sperimentale studiata in questo lavoro presenta una legge di iniezione ridotta rispetto al caso Spray H analizzato in precedenza: la durata complessiva dell'iniezione pari a 1.5 ms permette, come evidenziato da Skeen in [3], di investigare non solo le fasi di accensione, propagazione e stabilizzazione ma anche la fase successiva al termine dell'iniezione, analizzando lo sviluppo della fiamma e degli inquinanti in ogni fase del processo.

La prova sperimentale analizzata da Skeen in [3] e simulata in questo lavoro è stata effettuata utilizzando l'iniettore 210370: in tabella 5.1 sono riportate le principali caratteristiche dell'iniettore necessarie per caratterizzare lo spray di n-dodecano che si forma nel vessel.

Serial	D [mm]	C_d	C_a
210370	0.0908	0.89	0.98

Tabella 5.1: Caratteristiche dell'iniettore 210370.

In figura 5.2 è riportata la legge di iniezione del caso studiato: a differenza del caso Spray H analizzato nel capitolo precedente, l'ECN non fornisce direttamente la legge di iniezione misurata durante la prova sperimentale, ma raccomanda l'utilizzo di un tool sviluppato dal CMT-Motores Térmicos [39] che la genera a partire dalla pressione di iniezione e dalle caratteristiche dell'iniettore.

Il modello di spray è stato testato anche per il caso Spray A in condizioni non reagenti tramite il solver `dieselFoamAutoRefine`: in figura 5.3 sono riportate le lunghezze di penetrazione del vapore misurate e calcolate. Si può affermare che il modello lagrangiano

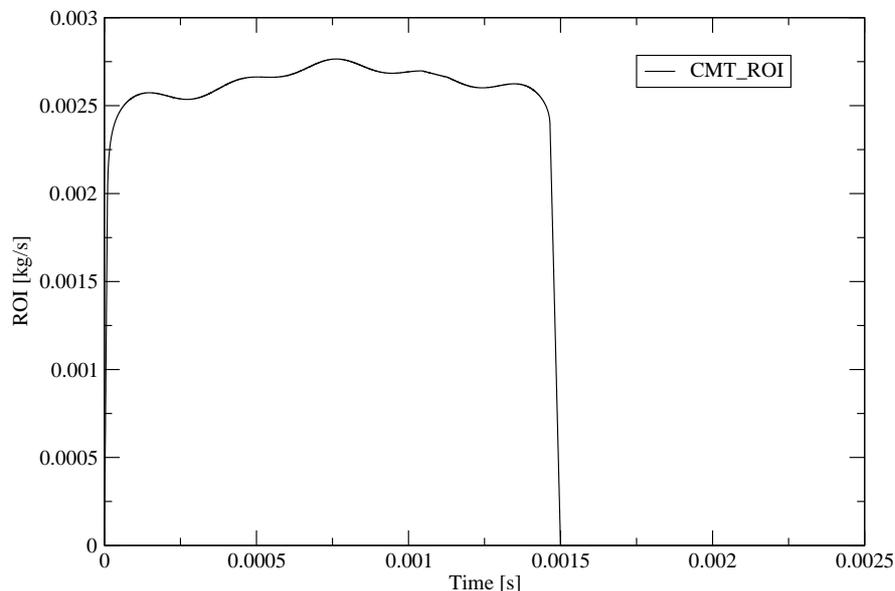


Figura 5.2: Legge di iniezione generata utilizzando l'utility sviluppata dal CMT.

utilizzato prevede correttamente lo sviluppo dello spray nelle condizioni studiate per il caso Spray A.

5.1.4 Solver chimico

Seguendo l'approccio proposto da Skeen in [3], l'analisi presentato in seguito comprenderà non solo lo studio della struttura di fiamma ad alta temperatura, ma anche la struttura del campo di formaldeide e di soot. Per poter svolgere quest'analisi è stato necessario cambiare il metodo di riduzione del meccanismo cinetico, mantenendo però inalterato il solver ODE e l'algoritmo ISAT: si è infatti notato che l'algoritmo di riduzione DAC, utilizzato per le prove Spray H, influisce negativamente sulla soluzione dell'equazioni del modello di soot, rendendo necessaria l'adozione dell'algoritmo DRG (Directed Relation Graph) che garantisce maggiore stabilità e accuratezza. Si rimanda a [40] e [41] per maggiori dettagli sul metodo di riduzione DRG.

5.1.5 Schemi cinetici per la combustione del n-dodecano

In questo lavoro sono stati utilizzati due meccanismi cinetici skeletal per la combustione del n-dodecano: il primo è il meccanismo Luo-Lu [42] basato sul meccanismo cinetico dettagliato LLNL per i 2-metil alcani [43], ampliato da Hawkes per includere il radicale OH^* nel meccanismo, il secondo è il meccanismo Faravelli, sviluppato dal CRECK Modeling Group del Politecnico di Milano, basato sullo schema cinetico dettagliato POLIMI_TOT_1407 [44].

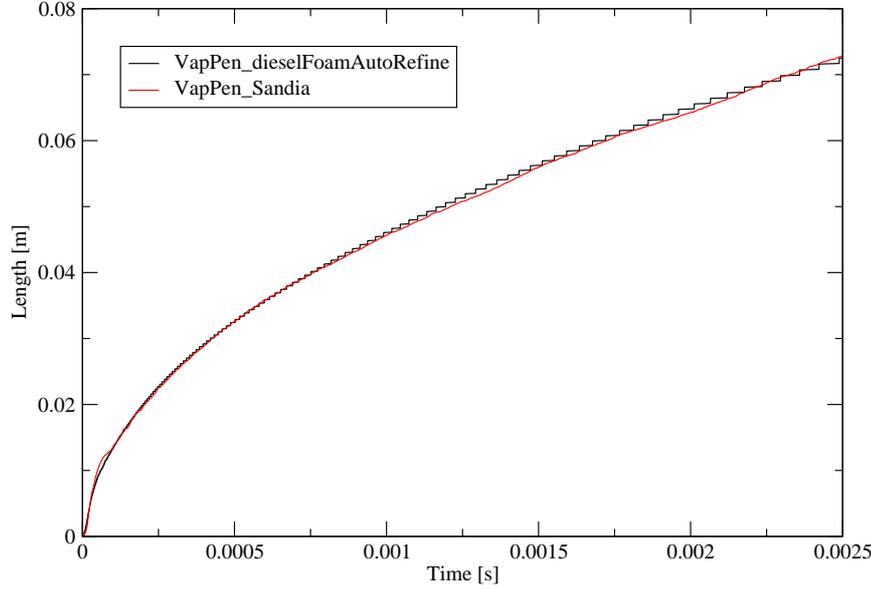


Figura 5.3: Confronto tra penetrazione del vapore calcolata e misurata.

In tabella 5.2 sono riportate le principali caratteristiche dei meccanismi utilizzati estratti dall'output di `OpenSMOKE ChemkinInterpreter`, che elabora e analizza gli schemi cinetici scritti in formato CHEMKIN.

Parallelamente alla risoluzione delle equazioni di trasporto dell'energia e delle specie chimiche nel dominio flamelet, è stato necessario risolvere anche delle equazioni di trasporto aggiuntive per valutare le emissioni di soot, in modo da poterli confrontare con i risultati sperimentali esposti da Skeen in [3].

Il modello semi-empirico di Moss [45] è stato utilizzato in questa analisi per stimare le emissioni di particolato. Questo modello prevede la risoluzione delle equazioni di trasporto per f_v (soot volume fraction, volume di soot per unità di volume) e per n (number density, numero di particelle di soot per unità di volume) tenendo conto dei processi di nucleazione, crescita superficiale, coagulazione e ossidazione, che possono essere scritte come:

$$\frac{\partial \rho_s f_v}{\partial t} - \frac{\chi}{2} \frac{\partial \rho_s f_v}{\partial Z^2} = \gamma n + \delta - \left(\frac{36\pi}{\rho_s^2} \right) n^{1/3} (\rho_s f_v)^{2/3} \dot{\omega}_{ox} \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial n/N_0}{\partial t} - \frac{\partial n/N_0}{\partial Z^2} = \alpha - \beta (n/N_0)^2 \quad (5.2)$$

dove α e δ tengono conto del processo di nucleazione, γ del processo di crescita superficiale, β quello di coagulazione, $\dot{\omega}_{ox}$ è il tasso di ossidazione, ρ_s è la densità del particolato e con N_0 è indicato il numero di Avogadro.

Il modello di Moss prevede che i termini di nucleazione, crescita superficiale, coagulazio-

	Luo-Lu	Faravelli
Number of species	111	96
Number of reactions	806	993
Irreversible reactions	679	796
Equilibrium reactions	127	197
Conventional reactions	771	960
Third body reactions (total)	35	33
Third body reactions	17	12
Fall-Off reactions	18	21

Tabella 5.2: Tabella riassuntiva degli schemi cinetici per n-dodecano.

ne ed ossidazione siano funzione della temperatura, della pressione e della concentrazione di un precursore, tipicamente l'acetilene (C_2H_2).

A partire da f_v è possibile calcolare la distribuzione della frazione massica di soot nel dominio Z come

$$Y_{soot}(Z, t) = \frac{\rho_s f_v(Z, t)}{\rho(Z, t)} \quad (5.3)$$

che può essere poi integrata nel dominio CFD giungendo quindi alla distribuzione del soot nel dominio fisico.

5.1.6 Analisi dei risultati

Si procede ora con l'analisi dei risultati delle simulazioni basati sul caso Spray A appena presentato: lo studio comprende il confronto dei risultati sperimentali forniti dall'ECN con i risultati numerici al variare del meccanismo cinetico, del numero di flamelet (singolo flamelet e 45 flamelet), del criterio di inizializzazione, del criterio di suddivisione dei domini chimici e del modello di interazione. Come già accennato in precedenza, oltre alle grandezze globali e ai rilievi di chemiluminescenza già utilizzati per il caso Spray H, verrà presentato il confronto con i rilievi PLIF dei campi di formaldeide (CH_2O) e PAH.

Simulazioni con flamelet singolo

Come per le prove basate sulla campagna sperimentale Spray H, il primo confronto effettuato è quello sulla struttura di fiamma a partire dalle rilevazioni sperimentali di chemiluminescenza in bomba, riportate in figura 5.4.

In figura 5.5 e 5.6 sono riportati i campi di temperatura e frazione massica di OH calcolati con i due meccanismi cinetici presi in considerazione in questo lavoro con il modello RIF singolo flamelet: come per le simulazioni basate sulla campagna sperimentale Spray

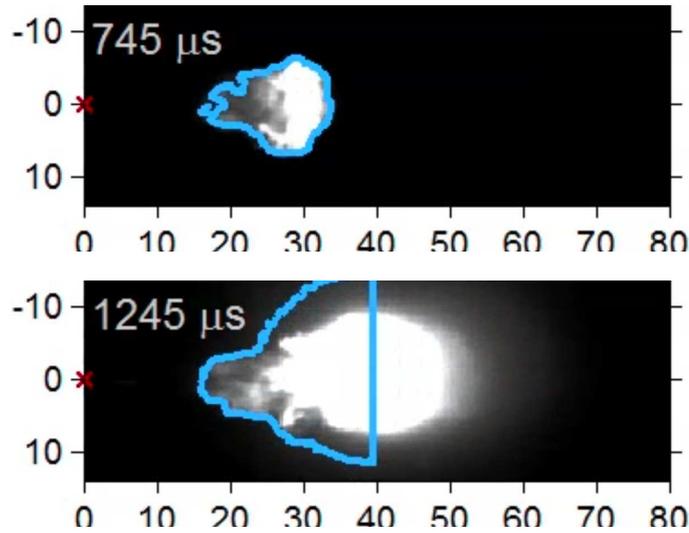


Figura 5.4: Emissione luminosa naturale a 0.75 ms e 1.25 ms. La linea blu indica le regione con luminosità pari al 50% della soglia massima di chemiluminescenza rilevabile, [28].

H, il modello singolo flamelet non è in grado di cogliere la zona di estizione turbolenta a valle del nozzle, quantificabile nei 16.1 mm di lift-off medio misurato in bomba. Si può inoltre notare che il meccanismo cinetico Faravelli sia, confrontato con quello Luo-Lu, particolarmente reattivo, specialmente alle basse temperature.

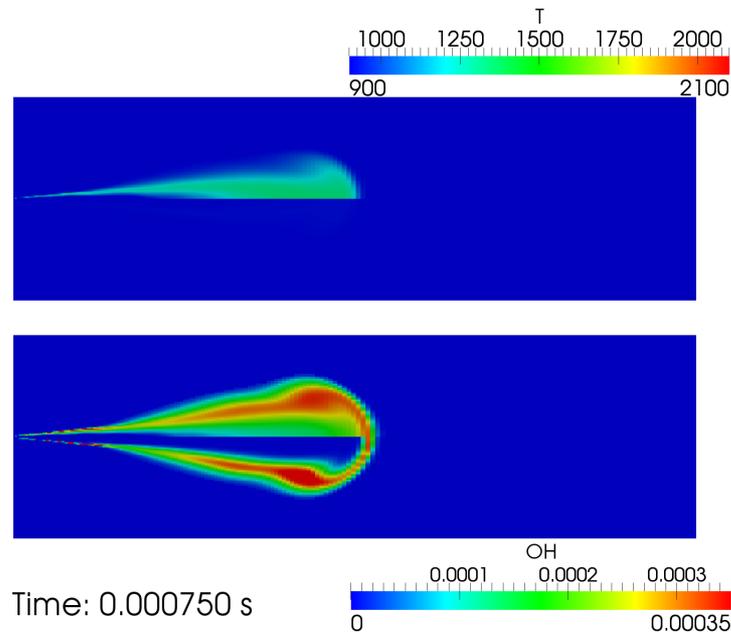


Figura 5.5: Campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 0.75 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu (prima immagine) e il meccanismo cinetico Faravelli (seconda immagine) con il modello RIF singolo flamelet.

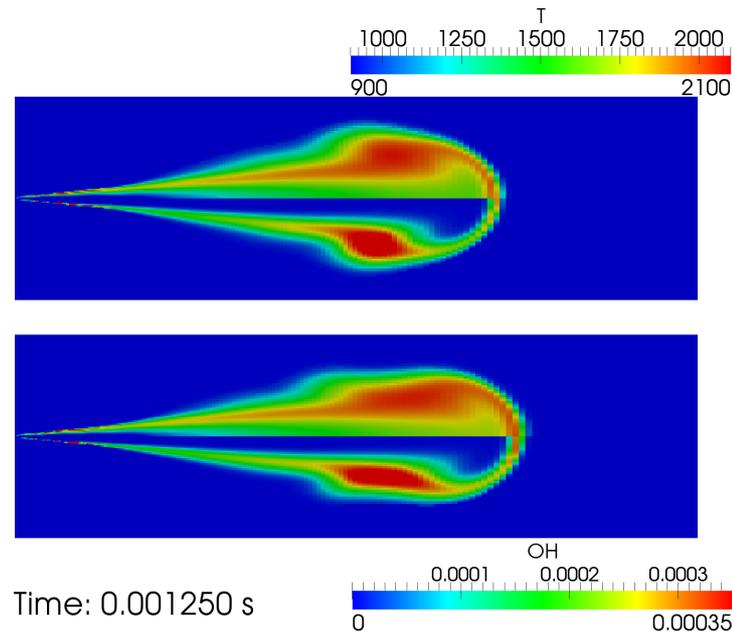


Figura 5.6: Campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1.25 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu (prima immagine) e il meccanismo cinetico Faravelli (seconda immagine) con il modello RIF singolo flamelet.

Simulazioni con flamelet multipli

Ancora una volta il modello mRIF, sia con criterio di inizializzazione Clone che con quello NoClone, risulta maggiormente affidabile nel predire la struttura di fiamma. In figura 5.7 e 5.8 sono riportati i campi di temperatura e OH calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu, Clone e NoClone, mentre in figura 5.9 e 5.10 sono riportati gli stessi campi calcolati utilizzando lo schema cinetico Faravelli utilizzando sempre 45 flamelet.

Analizzando i risultati ottenuti, si possono ritrovare le principali considerazioni presentate durante l'analisi delle simulazioni basate sulla campagna sperimentale Spray H, che posso essere così riassunte:

- considerato l'elevato numero di flamelet utilizzato, le soluzioni calcolate con i due criteri di inizializzazione differiscono prevalentemente nella fase di ignition, particolarmente sensibile al livello di avanzamento delle prime reazioni a bassa temperatura nei domini Z , soprattutto per le simulazioni con meccanismo cinetico Luo-Lu, a causa della bassa reattività alle basse temperature
- la lunghezza di lift-off e la struttura di fiamma bilobata a valle della zona di extinction riscontrabile nelle rilevazioni di chemiluminescenza sono ben colti da tutte le simulazioni effettuate con il modello mRIF
- la zona in cui si sviluppano le reazioni di alta temperatura è concentrata intorno alla linea con rapporto di equivalenza stechiometrico, che viene deformata radialmente dalla presenza del fronte di fiamma

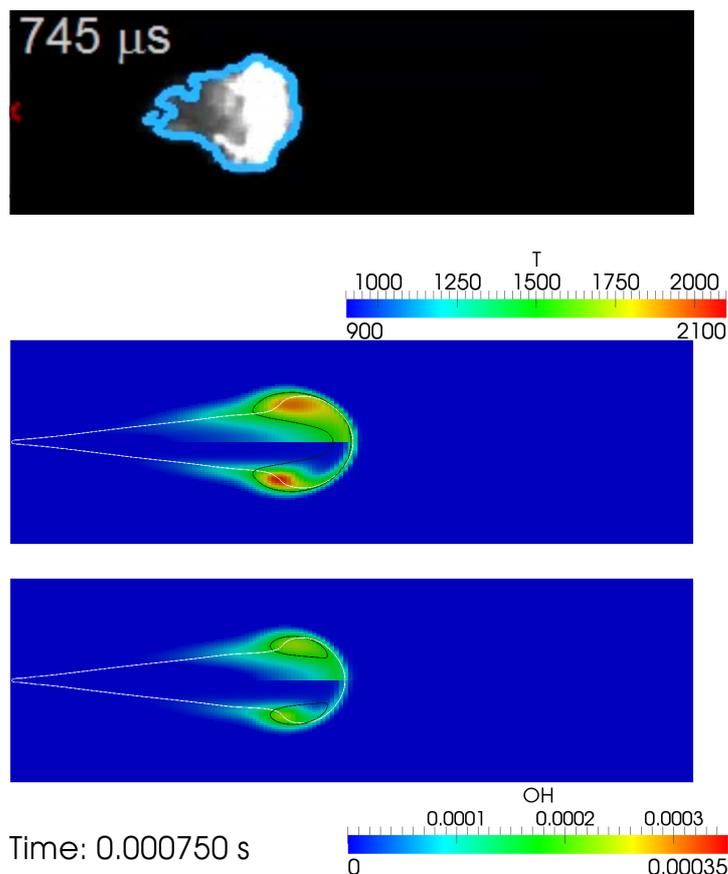


Figura 5.7: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 0.75 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu e i criteri di inizializzazione Clone (seconda immagine) e No-Clone (terza immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

- la regione in cui avviene l'ignition è correttamente posizionata leggermente a monte la testa della penetrazione del vapore intorno la linea che definisce la miscela stechiometrica

In figura 5.11 è riportato il confronto tra lift-off misurato sperimentalmente e calcolato con i due meccanismi cinetici e i due criteri di inizializzazione: il valore stazionario è colto con buona accuratezza nei quattro casi considerati, con il meccanismo cinetico Luo-Lu che si attesta su valori medi leggermente superiori rispetto allo schema cinetico Faravelli.

In figura 5.12 è presentato il confronto tra le curve di pressione sperimentale e calcolate con il modello mRIF mentre in figura 5.13 il confronto è effettuato sulla derivata temporale della curva di pressione.

Il primo aspetto di interesse da osservare è che anche da questa analisi si ha la conferma della maggior reattività del meccanismo cinetico Faravelli, visualizzabile nel minor ignition delay sia con il criterio di inizializzazione Clone che con quello NoClone. Si può notare inoltre che le differenze in termini di ritardo all'accensione, avanzamento delle reazioni a

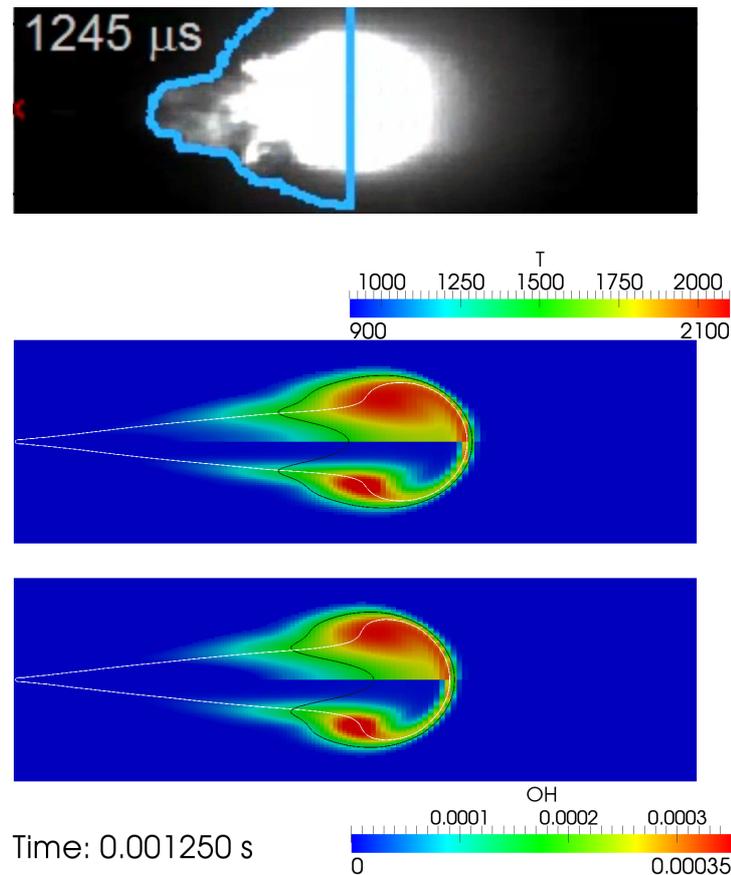


Figura 5.8: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1.25 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu e i criteri di inizializzazione Clone (seconda immagine) e No-Clone (terza immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

bassa temperatura, rilascio di calore premiscelato e in fase diffusiva al variare del criterio di inizializzazione sono notevolmente più marcate rispetto ai casi con n-eptano della campagna sperimentale Spray H: la causa va ricercata nella maggiore complessità del processo di combustione del n-dodecano e quindi dei suoi meccanismi cinetici (il numero di specie chimiche e reazioni elementari degli schemi cinetici per la combustione di paraffine lineari sono tendenzialmente proporzionali al numero di atomi di carbonio che formano lo scheletro della molecola) che induce una maggiore sensibilità alle condizioni iniziali del dominio chimico. Lo schema cinetico Lu-Law, non particolarmente dettagliato in termini di reazioni a bassa temperatura, non presenta rilascio di calore né nella fase di reazioni di fiamma fredda né in fase premiscelato qual'ora si utilizzi il criterio di inizializzazione NoClone, rilevati invece con quello Clone: in seguito verranno presentate alcune modifiche al setup volte a migliorare la capacità di predire questi aspetti anche con il criterio NoClone. Per quanto riguarda l'andamento della derivata temporale della curva di pressione, il picco legato alla fase premiscelata è sottostimato e ritardato temporalmente da

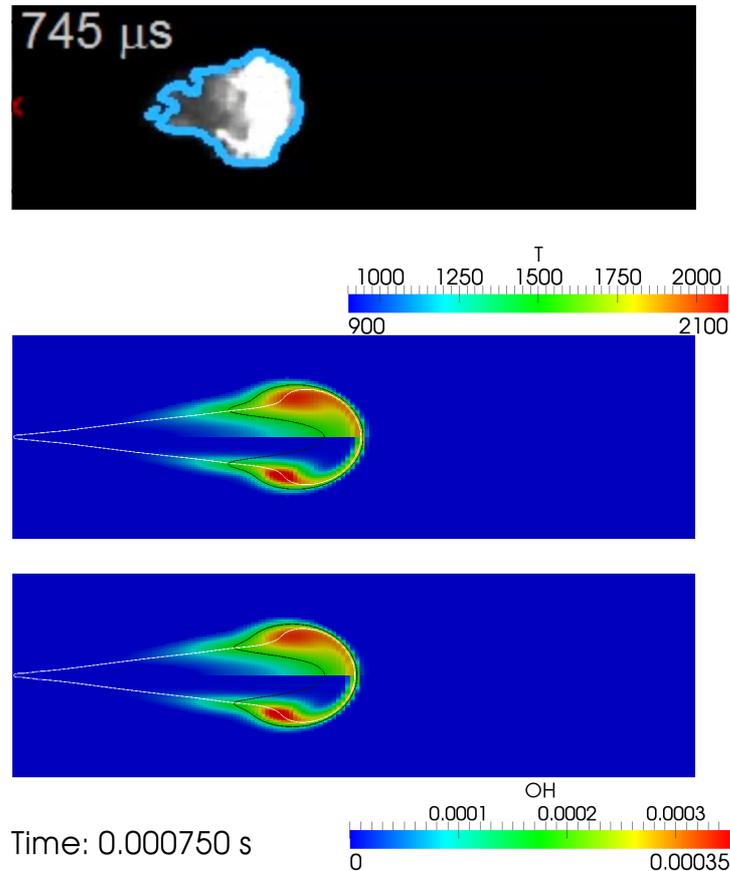


Figura 5.9: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 0.75 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Faravelli e i criteri di inizializzazione Clone (seconda immagine) e NoClone (terza immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

tutte le simulazioni effettuate, e in particolar modo da quelle con criterio di inizializzazione NoClone.

Simulazioni con criterio di suddivisione basato sulla varianza dello scalar dissipation rate

Si procede ora ad analizzare i risultati ottenuti utilizzando il criterio di suddivisione basato sulla varianza dello SDR.

Il criterio proposto da Barths e presentato nel capitolo 3 è purtroppo inadeguato per il setup del caso, in particolar modo a causa della mesh particolarmente raffinata nella zona del nozzle, e tende a generare in rapida sequenza tutti i flamelet disponibili, allocando molta della massa di combustibile nell'ultimo flamelet utile. Per poter quindi utilizzare il criterio di suddivisione basato sullo scalar dissipation rate è stato necessario sviluppare un nuovo criterio e implementarlo parallelamente a quello già presente nella *Lib-ICE*.

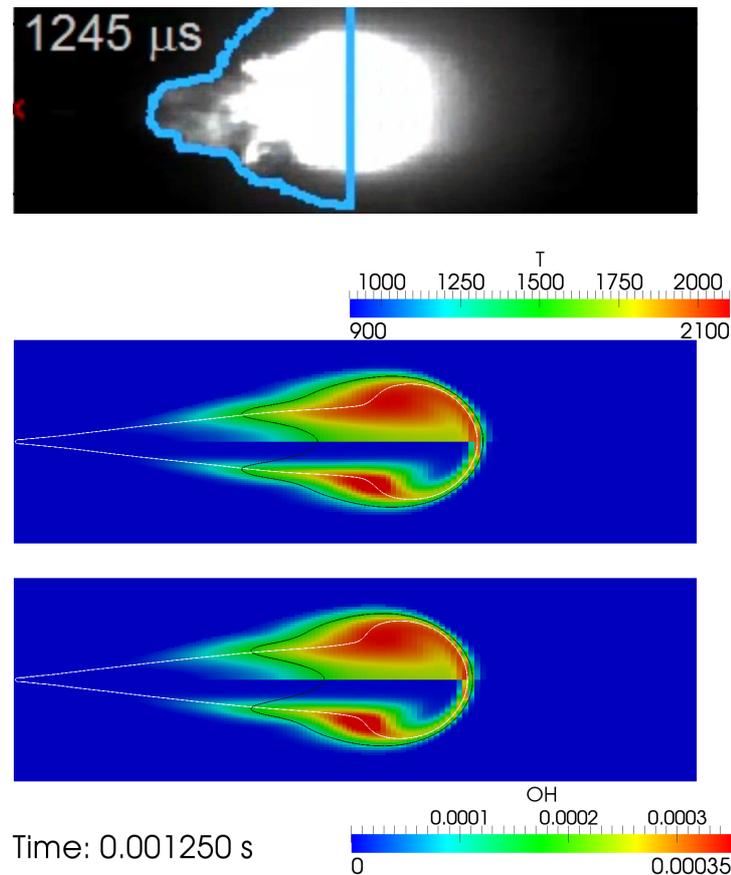


Figura 5.10: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura (pannello superiore) e frazione massica di OH (pannello inferiore) a 1.25 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Faravelli e i criteri di inizializzazione Clone (seconda immagine) e NoClone (terza immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

In realtà le varianti al criterio proposto da Barths sviluppate in questo lavoro sono state numerose, ma si procede ora con la descrizione dell'approccio e l'analisi dei risultati unicamente per quello che ha presentato i risultati più soddisfacenti.

Il criterio proposto in questo lavoro prevede che un nuovo flamelet venga generato nel caso si realizzino le condizioni previste dal criterio di Barths o qual'ora lo scalar dissipation rate stechiometrico medio del flamelet madre sia in diminuzione e al di sotto di un certo valore di soglia, che nelle condizioni operative del caso studiato è stimabile pari a 125 1/s.

Quando uno di questi due gruppi di condizioni si realizza, viene generato un nuovo flamelet a cui viene assegnato la parte di combustibile appartenente al flamelet madre con $\tilde{\chi}$ maggiore della metà della somma tra il valor medio e la mediana di $\tilde{\chi}(\vec{x}, t)$: questo valore di soglia fa sì che gran parte del combustibile avente rapporto di equivalenza intorno al valore stechiometrico venga assegnato al flamelet madre. La massa di combustibile successivamente iniettata ed evaporata viene attribuita al nuovo flamelet mentre il flamelet madre si allontana dall'iniettore: l'ultimo flamelet attivato sarà quindi il flamelet madre

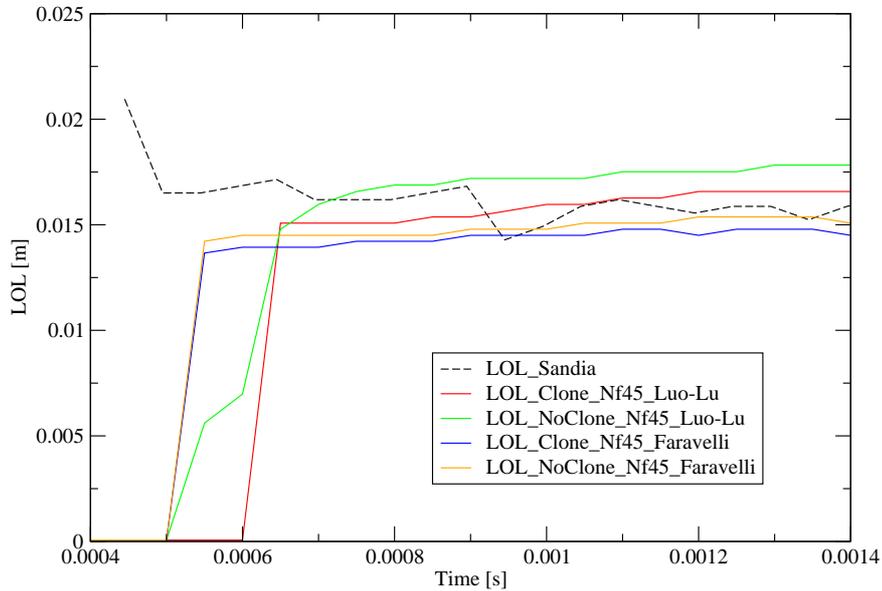


Figura 5.11: Confronto tra Lift-Off Length sperimentale e calcolate.

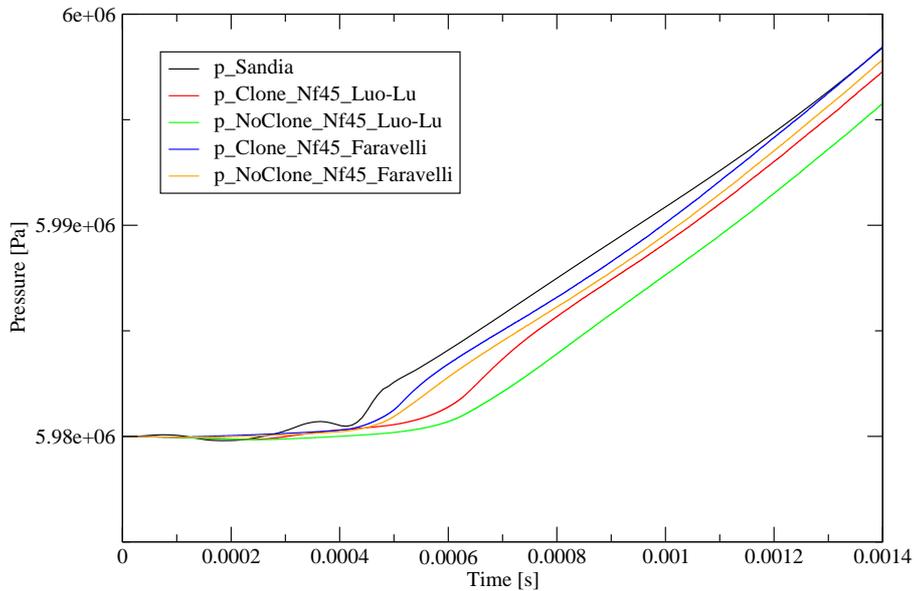


Figura 5.12: Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate.

durante il successivo evento di generazione di un nuovo dominio chimico.

Il confronto tra i risultati così ottenuti con quelli precedentemente esposti, calcolati con

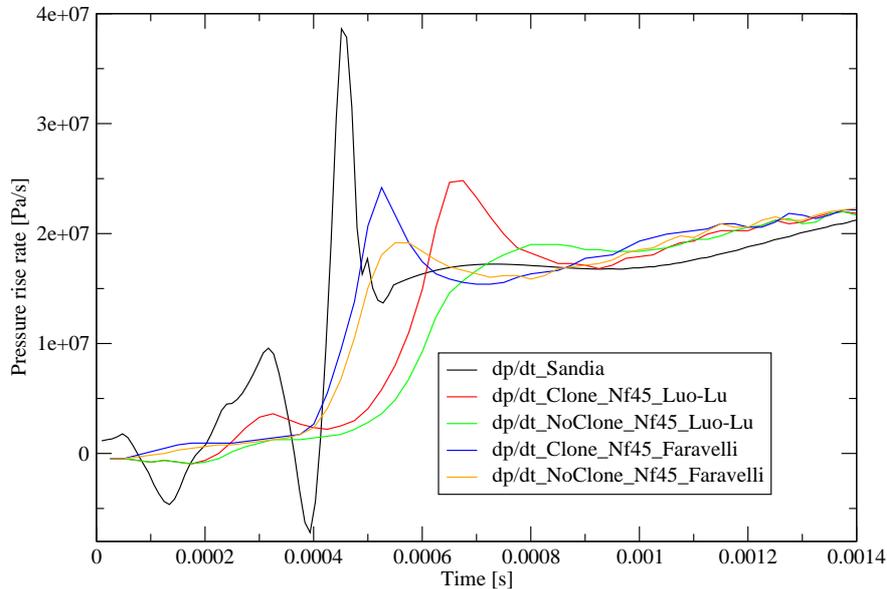


Figura 5.13: Confronto tra pressure rise rate sperimentale e calcolate.

il criterio di suddivisione basato sulla massa di combustibile iniettato, criterio di inizializzazione Clone e 45 flamelet, non ha presentato sostanziali differenze in termini di struttura di fiamma, e lo stesso vale per le curve di pressione, pressure rise rate e lift-off: questo lascia intendere che i due criteri considerati convergono ad un'unica soluzione all'aumentare del numero di flamelet utilizzati. Vista quindi la sostanziale indifferenza nell'utilizzo di uno o dell'altro criterio di suddivisione, si è deciso di continuare nell'adozione del solo criterio di suddivisione basato sulla massa di combustibile iniettato, più regolare e prevedibile nella logica di generazione dei nuovi flamelet.

Sensibilizzazione delle prove con criterio di inizializzazione NoClone

Si procede ora a presentare due strategie utilizzate in questo lavoro per cercare di sensibilizzare il criterio di inizializzazione NoClone accoppiato con il meccanismo cinetico Luo-Lu alla fase di reazioni a bassa temperatura e all'accensione premiscelata: si è infatti discusso in precedenza di come la soluzione ottenuta con il NoClone e uno schema cinetico non particolarmente reattivo non presenti rilascio di calore né durante la first-stage ignition né in fase premiscelata, presente invece nelle soluzioni Clone e/o calcolate con il meccanismo cinetico Faravelli.

Il primo approccio utilizzato è stato quello di impiegare il modello di interazione Attack: l'interazione tra i flamelet a basso livello di avanzamento e con i contingui può avere effetti positivi sulla legge di rilascio del calore. In prima analisi si può quindi passare al confronto

tra la curva di pressione sperimentale e quelle ottenute con il criterio di inizializzazione Clone e NoClone, con e senza modello di interazione Attack, presentato in figura 5.14.

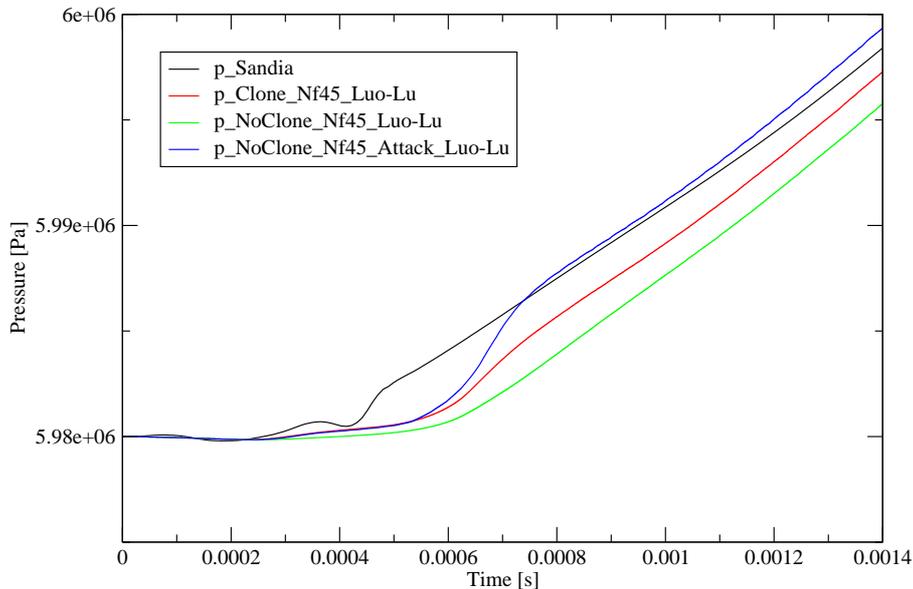


Figura 5.14: Confronto tra curva di pressione sperimentale e calcolate con il criterio di inizializzazione Clone e NoClone e NoClone con modello di interazione Attack, utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu.

Come prevedibile, l'interazione tra flamelet permette di cogliere i fenomeni di fiamma fredda e il picco di rilascio di calore in fase premiscelata: l'interazione è così intensa che il picco di rilascio del calore sovrastima pesantemente il valore sperimentale, come accade nel caso di flamelet singolo. Questo ci porta a pensare che la soluzione con modello di interazione Attack sia affetta da un eccessivo mixing tra flamelet con diverso livello di avanzamento, cadendo in una situazione intermedia tra un caso singolo flamelet e uno multiple flamelet Clone. Un'ulteriore conferma giunge dalla struttura di fiamma, riportata in figura 5.15.

La struttura fortemente allunga ricorda quella tipica dei casi singolo flamelet ma con la presenza della regione di extinction a valle dell'iniettore, anche se di estensione inferiore rispetto ai casi Clone e NoClone. Si può quindi concludere che l'interazione tra flamelet permette sì di cogliere con maggior precisione il rilascio di calore durante la fase di first-stage ignition e la seguente fase di accensione premiscelata anche nel caso di criterio di inizializzazione NoClone, ma allo stesso tempo inficia pesantemente la struttura di fiamma in regime diffusivo, rendendo quindi preferibile comunque la soluzione senza interazione. Lo sviluppo di un nuovo modello di interazione capace di risolvere contemporaneamente sia la legge di rilascio del calore che la struttura di fiamma può essere in ottica futura un

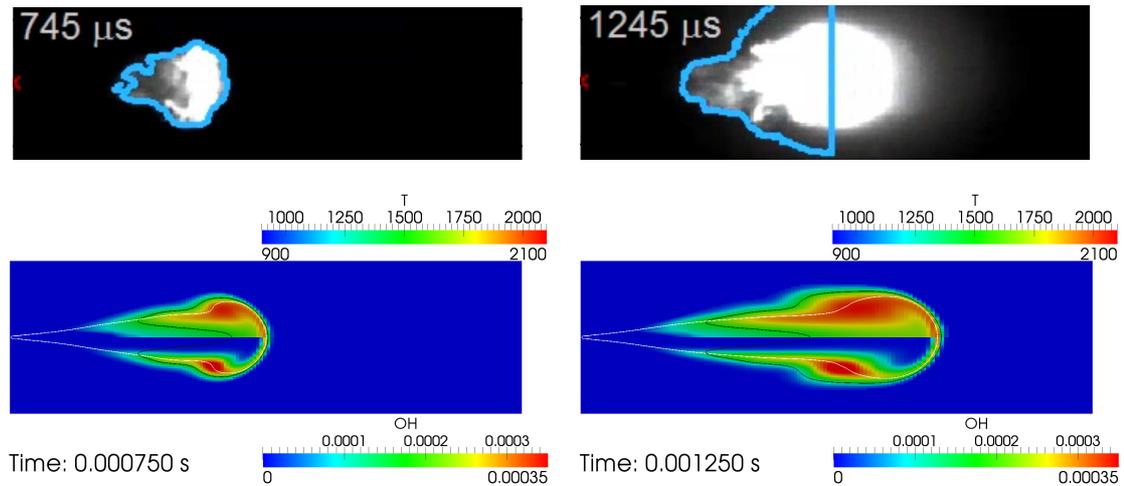


Figura 5.15: Chemiluminescenza, campo di temperatura e frazione massica di OH a 0.75 ms e 1.25 ms calcolati utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu con criterio di inizializzazione NoClone e modello di interazione Attack. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolina nera unisce i punti a 1500 K.

interessante spunto di ricerca.

Come già espresso in precedenza, la causa principale della mancata risoluzione della first-stage ignition qual'ora si adoperi il criterio di inizializzazione NoClone è da ricercarsi nel ridotto livello di avanzamento dei domini flamelet, inizializzati con la soluzione di pure-mixing, al momento del raggiungimento delle condizioni termodinamiche e fluidodinamiche favorevoli all'accensione. La seconda strategia percorsa si muove proprio nella direzione di migliorare la stima del livello di avanzamento delle reazioni chimiche dei flamelet rappresentati il vapore di combustibile in testa allo spray nella prima fase di accensione.

Il criterio di suddivisione basato sulla massa di combustibile iniettato prevede che i vapori vengano uniformemente distribuiti tra i flamelet: i diversi $\widehat{\chi}_{st,l}$ decrescono rapidamente dal momento in cui il flamelet successivo viene generato, non rappresentando più la regione prossima al nozzle dell'iniettore, permettendo l'instaurarsi delle prime reazioni a bassa temperatura. Nonostante il numero flamelet già elevato, si è cercato di cogliere lo sviluppo delle reazioni a bassa temperatura nel dominio fisico incrementando il tasso di generazione dei flamelet nella delicata fase iniziale di penetrazione e mixing dello spray.

Si è quindi provveduto a implementare all'interno del solver `RIFdieselFoam` la possibilità di definire una distribuzione arbitraria della massa di combustibile iniettato e dei suoi vapori sui diversi flamelet. Oltre alla distribuzione uniforme già presentata in precedenza, si è verificato il comportamento del modello utilizzando il criterio di suddivisione basato sulla massa di combustibile iniettato utilizzando tre differenti distribuzioni, riportate in figura 5.16: i nodi del polinomio di Chebyshev e le ordinate delle funzioni x^4 e x^5 .

Nonostante il maggior dettaglio nella rappresentazione della prima parte di combustibile iniettato e il rapido abbassamento dei $\widehat{\chi}_{st,l}$ dei primi flamelet, l'utilizzo di queste logiche di generazione dei flamelet non ha garantito i benefici sperati, nè in termini di rilascio del

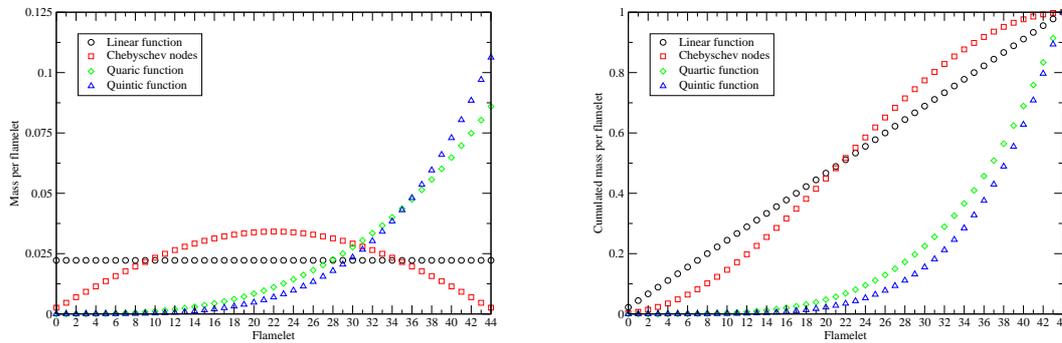


Figura 5.16: Frazione di massa rappresentata dai flamelet (a sinistra) e cumulata (a destra) per quattro differenti logiche di suddivisione basate sulla massa di combustibile iniettato.

calore n  per quanto riguarda la struttura di fiamma, restituendo soluzioni sostanzialmente identiche a quelle ottenute con la distribuzione uniforme della massa di combustibile sui diversi domini chimici, che   quindi da preferirsi sia in termini di riduzione dei tempi di calcolo che nell'ottica di una miglior rappresentazione dell'intero processo.

Analisi basata sulle rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH

Per concludere, si passa ora al confronto basato sulle rilevazioni PLIF (Planar Laser-Induced Fluorescence) di formaldeide (CH_2O) e PAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbon) effettuate nelle condizioni operative appena investigate e presentate ed analizzate da Skeen in [3]. Questa analisi   di fondamentale importanza in quanto mira a una miglior comprensione dei fenomeni di accensione, stabilizzazione e formazione del particolato, aspetti che tutt'ora catalizzano gli sforzi di numerosi centri di ricerca.

La transizione da first-stage ignition a second-stage ignition   centrale nell'instaurarsi del fenomeno di stabilizzazione di una fiamma quasi-stazionaria liftata: la formaldeide   uno dei prodotti intermedi pi  rilevanti nella fase di reazione a bassa temperatura, e il confronto con i rilevamenti PLIF di formaldeide pu  quindi fornire un indicatore della bont  del modello in termini di predizione della first-stage ignition. Centrale   inoltre il confronto con le rilevazioni degli idrocarburi policiclici aromatici: precursori chiave del particolato, possono essere utilizzati come marker della regione di formazione del soot, fornendo un banco di prova per il modello di soot presentato in precedenza.

In figura 5.18 sono presentate le rilevazioni PLIF di formaldeide accoppiate con le immagini schlieren durante la first-stage ignition.

Le reazioni di bassa temperatura si sviluppano nelle regioni periferiche della testa dello spray e sono visualizzabili sia dalle immagini schlieren che dalle rilevazioni PLIF. Le prime reazioni ad alta temperatura intervengono 0.39 ms dopo l'inizio dell'iniezione e sono rilevabili nel brusco allargamento della testa dello spray: la formaldeide permane nella

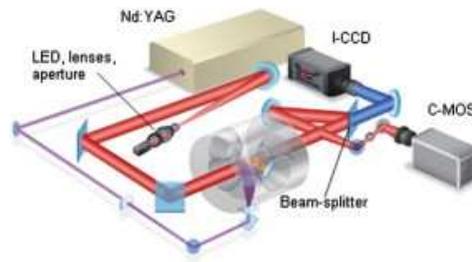


Figura 5.17: Apparato sperimentale per l'acquisizione simultanea di immagini high-speed schlieren e rilevazioni PLIF, [3].

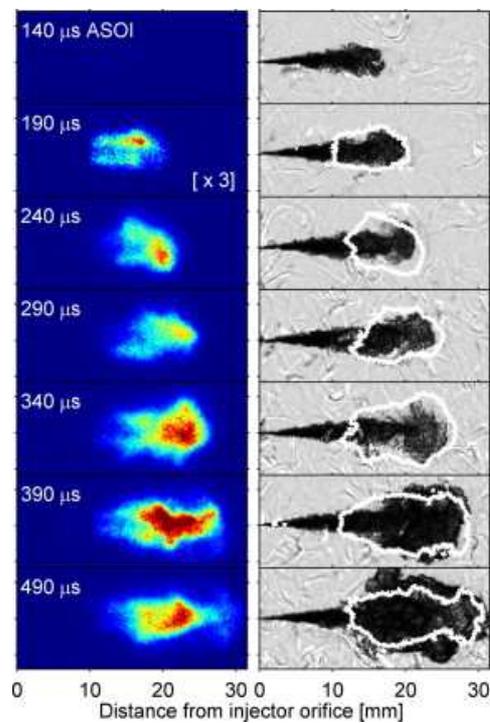


Figura 5.18: Rilevazioni PLIF di formaldeide (a sinistra) e immagini schlieren (a destra). La linea bianca nelle immagini schlieren corrisponde alla regione con segnale PLIF pari al 10% del valore massimo istantaneo, [3].

regione di lift-off dalla parte dell'iniettore confermando l'importanza delle reazioni a bassa temperatura sul fenomeno di stabilizzazione del fronte di fiamma.

Dal confronto con le simulazioni, presentato in figura 5.19, 5.20 e 5.21, si possono trarre interessanti considerazioni sulle capacità di predizione del modello di combustione.

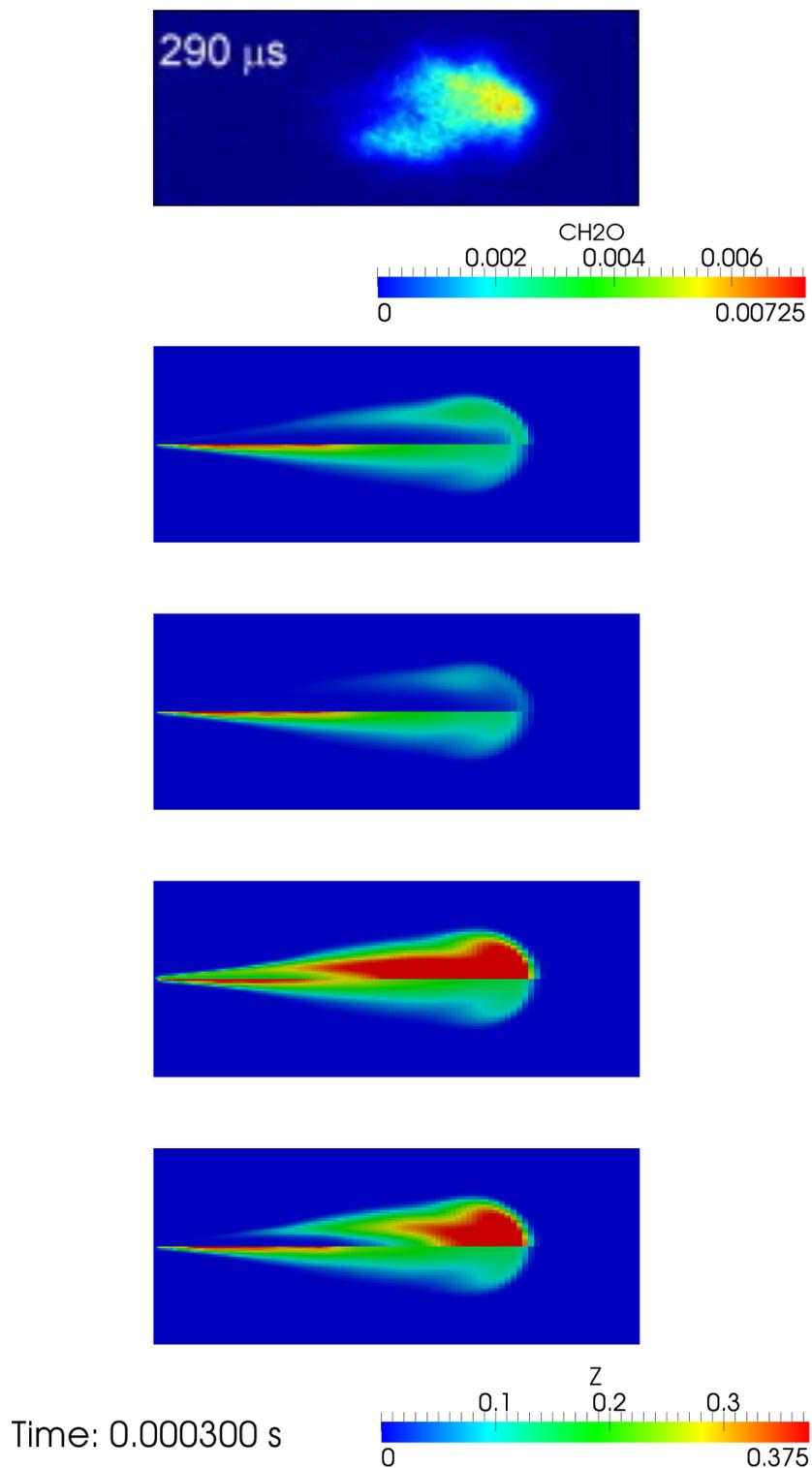


Figura 5.19: Rilevazioni PLIF di formaldeide a 0.0003 s, mixture fraction (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu utilizzando il criterio di inizializzazione Clone (seconda immagine) e NoClone (terza immagine) e con il meccanismo cinetico Faravelli, Clone (quarta immagine) e NoClone (quinta immagine).

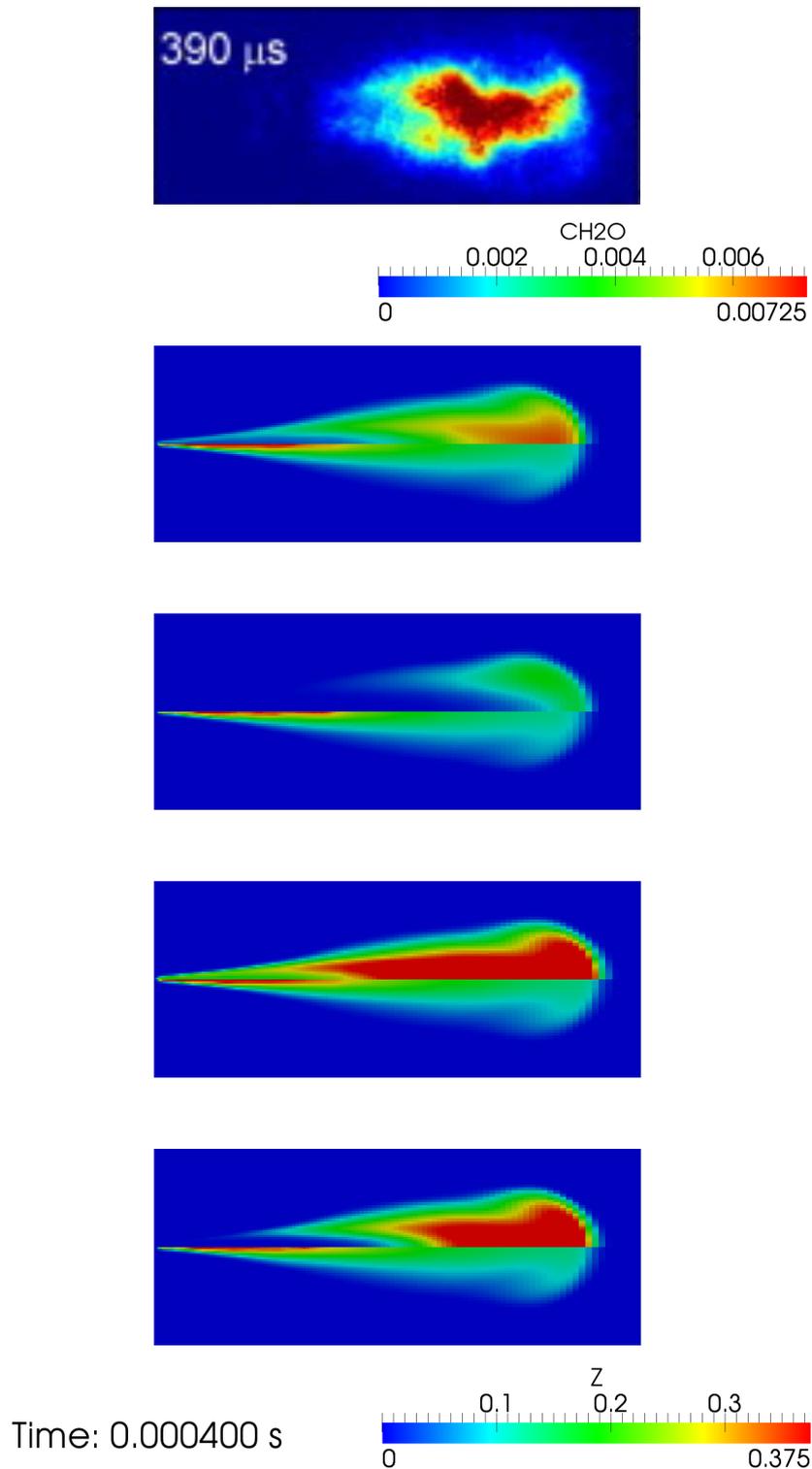


Figura 5.20: Rilevazioni PLIF di formaldeide a 0.0004 s, mixture fraction (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu utilizzando il criterio di inizializzazione Clone (seconda immagine) e NoClone (terza immagine) e con il meccanismo cinetico Faravelli, Clone (quarta immagine) e NoClone (quinta immagine).

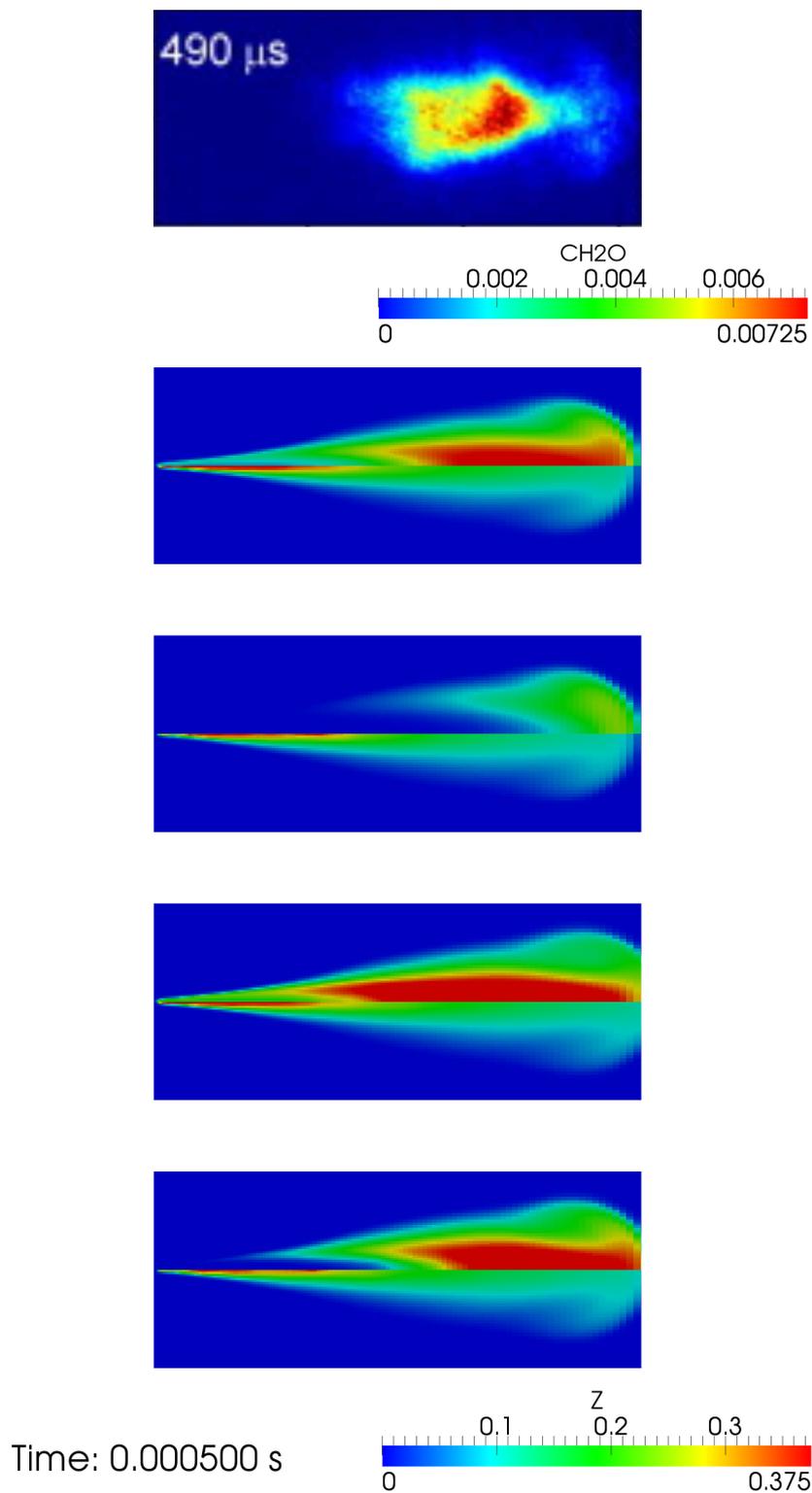


Figura 5.21: Rilevazioni PLIF di formaldeide a 0.0005 s, mixture fraction (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu utilizzando il criterio di inizializzazione Clone (seconda immagine) e NoClone (terza immagine) e con il meccanismo cinetico Faravelli, Clone (quarta immagine) e NoClone (quinta immagine).

Le simulazioni presentate sono state effettuate utilizzando sia il meccanismo cinetico Luo-Lu che il Faravelli con i criteri di inizializzazione Clone e NoClone. La regione in cui si sviluppano le reazioni di fiamma fredda è risolta correttamente solo nelle simulazioni con criterio di inizializzazione NoClone: le prove Clone infatti presentano una zona di reazione che si sviluppa fino all'ugello dell'iniettore, causato dalla presenza dei prodotti intermedi di reazioni già al momento dell'attivazione del nuovo flamelet.

In figura 5.22 sono presentati gli scatter plot della frazione massica di formaldeide in funzione della mixture fraction a 0.4 ms ricavati dalle simulazioni Clone e NoClone effettuate con il meccanismo cinetico Luo-Lu.

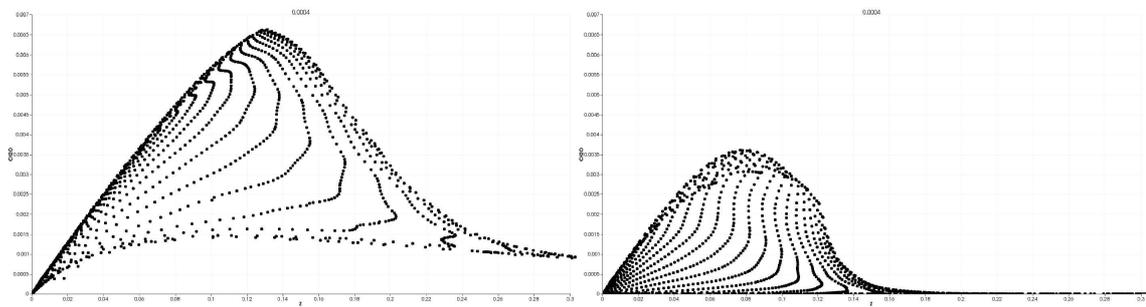


Figura 5.22: Scatter plot della frazione massica di formaldeide in funzione della mixture fraction a 0.0004 s, calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu utilizzando il criterio di inizializzazione Clone (a sinistra) e NoClone (a destra).

Nel caso Clone la frazione massica di CH_2O presenta, per ogni valore di mixture fraction diverso da 0, una distribuzione con grado di avanzamento non nullo, al contrario del caso NoClone: associabile alla distanza dall'iniettore in cui si innescano le prime reazioni di fiamma fredda, la distribuzione ottenuta con il criterio di inizializzazione Clone non è quindi allineata con le rilevazioni sperimentali.

La situazione è paragonabile a quella presentata per la regione di reazione ad alta temperatura nei casi di flamelet singolo, che non presentano la regione di lift-off, imponendo quindi l'utilizzo del criterio di inizializzazione NoClone almeno per lo studio fondamentale del processo di combustione a bassa temperatura.

Analizzando poi le variazioni causate dal meccanismo cinetico, si può affermare che lo schema Faravelli, che si ricorda essere particolarmente reattivo alle basse temperature, restituisce un campo di formaldeide sviluppato in direzione assiale, con la regione ad elevata frazione massica di CH_2O corrispondente con la regione di formazione rilevata dalle prove sperimentali.

In figura 5.23 sono riportate le rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH insieme alle immagini schlieren durante la fase di combustione ad alta temperatura.

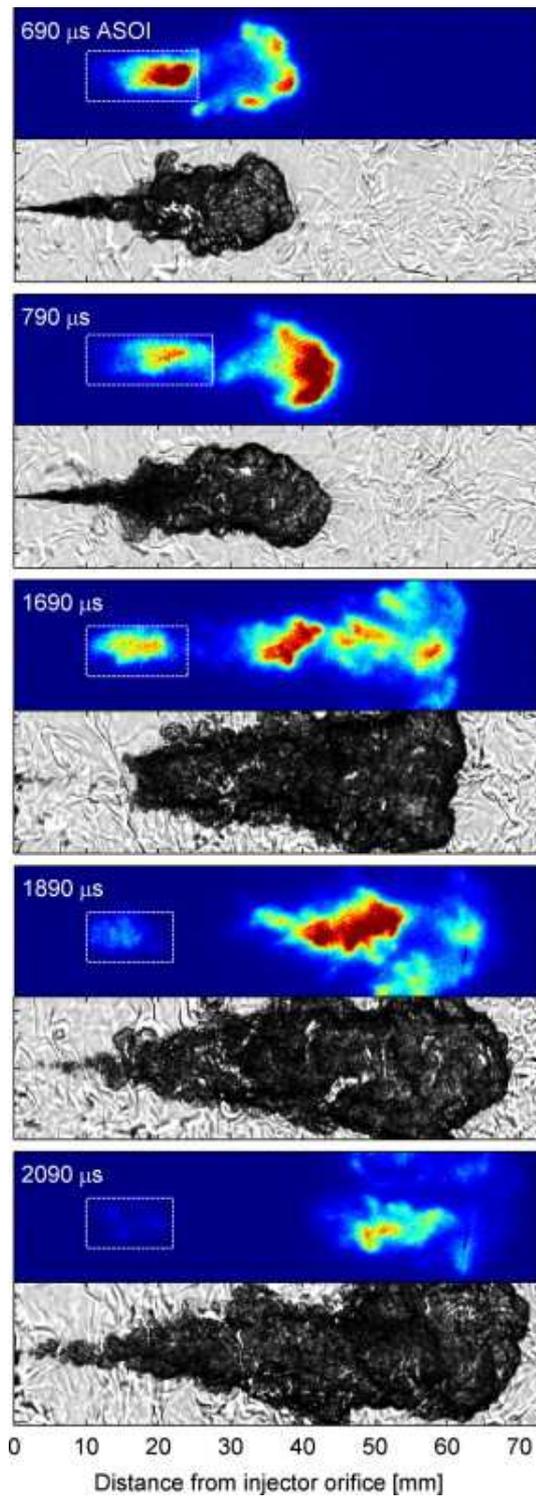


Figura 5.23: Rilevazioni PLIF di formaldeide (riquadro bianco tratteggiato) e PAH (pannello superiore in ogni coppia) e immagini schlieren (pannello inferiore in ogni coppia), [3].

La formaldeide, prodotto di reazione della fase di combustione a bassa temperatura, viene consumata dalle reazioni ad alta temperatura, mentre nella regione ricca dello spray si ha la contemporanea formazione degli idrocarburi policiclici aromatici. Finita l'iniezione

di combustibile, la fiamma ha un rapido moto di recessione verso l'ugello dell'iniettore, consumando così la maggior parte dei prodotti intermedi che si erano formati a monte del lift-off durante la fase a bassa temperatura.

Si passa ora ad analizzare il confronto tra le rilevazioni sperimentali e i risultati delle simulazioni, presentati in figura 5.24, 5.25, 5.26 e 5.27, ottenuti con il criterio di inizializzazione NoClone utilizzando sia il meccanismo cinetico Luo-Lu che il meccanismo Faravelli.

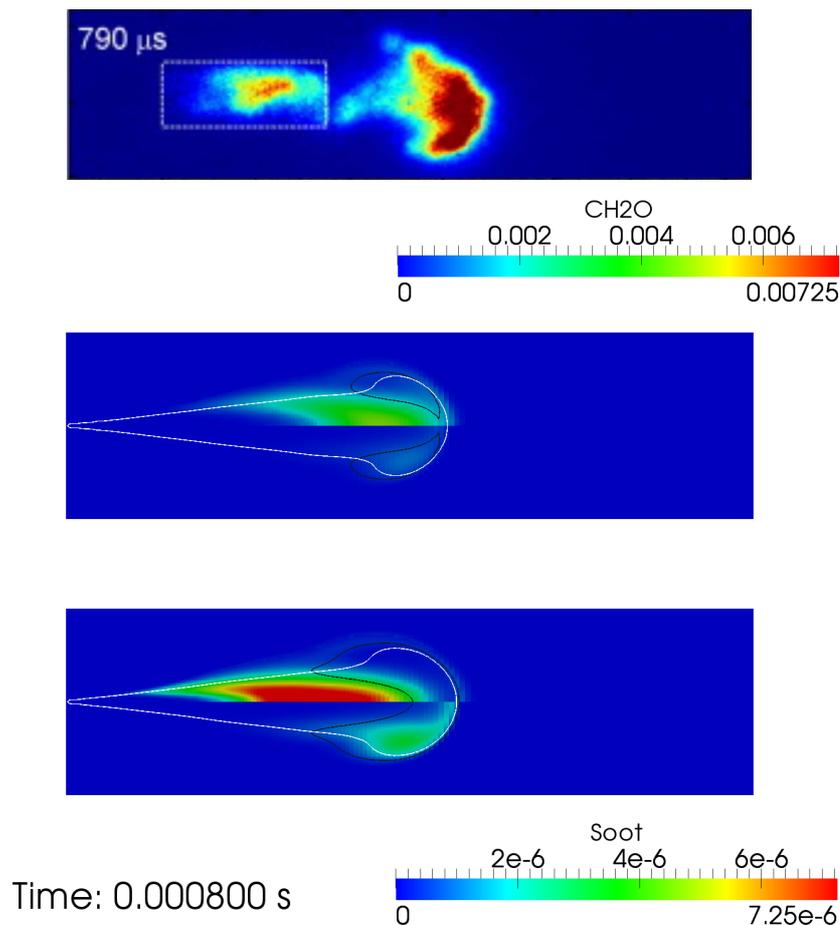


Figura 5.24: Rilevazioni PLIF di formaldeide (riquadro bianco tratteggiato) e PAH a 0.0008 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Il modello prevede correttamente il consumo di formaldeide da parte delle reazioni di combustione ad alta temperatura: la formaldeide permane infatti nella regione ricca dello spray a temperature inferiori a 1500 K, corrispondente alla regione di lift-off dalla parte dell'iniettore. Questa regione è però sovrastimata, coerentemente con sovrastima del ritardo all'accensione: il ridotto sviluppo delle reazioni ad alta temperatura porta ad avere CH_2O laddove le rilevazioni sperimentale indicano una già completa conversione.

Contemporaneamente al consumo di formaldeide, il soot inizia a formarsi nelle regioni ricche del fronte di fiamma caratterizzate da temperature superiori a 1500 K, in linea con i modelli fenomenologici di soot.

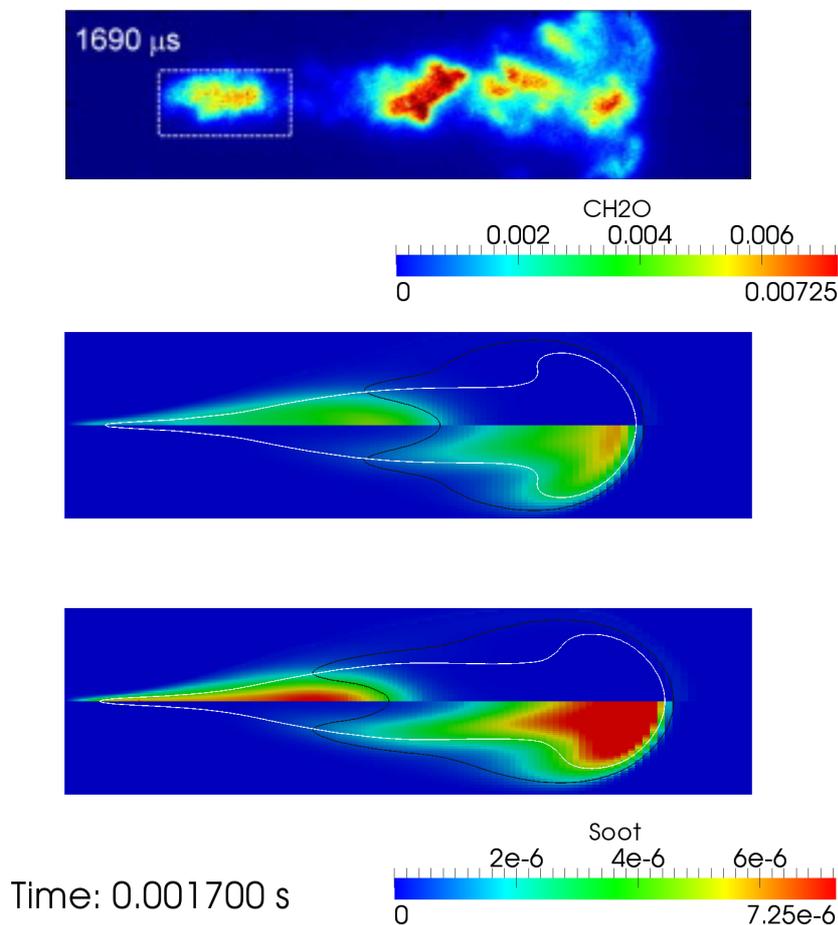


Figura 5.25: Rilevazioni PLIF di formaldeide (riquadro bianco tratteggiato) e PAH a 0.0017 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Terminata l'iniezione di combustibile, il fronte di fiamma si muove in direzione dell'iniettore, coerentemente con quanto rilevato durante le prove sperimentali: il modello non riesce però a cogliere a pieno la velocità con cui il fronte di fiamma si muove nel suo moto di recessione. Da notare inoltre che anche Skeen in [3] afferma che la velocità con cui il fronte di fiamma si muove verso l'iniettore, e la conseguente regione di consumo della formaldeide, supera i valori attesi di propagazione del fronte di fiamma, lasciando quindi spazio ad ulteriori analisi, sia sperimentali che numeriche.

Il soot è posizionato, anche in questa situazione, coerentemente con la regione in cui si rileva la presenza degli idrocarburi policiclici aromatici, con distribuzione spostata in prossimità della testa dello spray e confinata nella regione con miscela ricca.

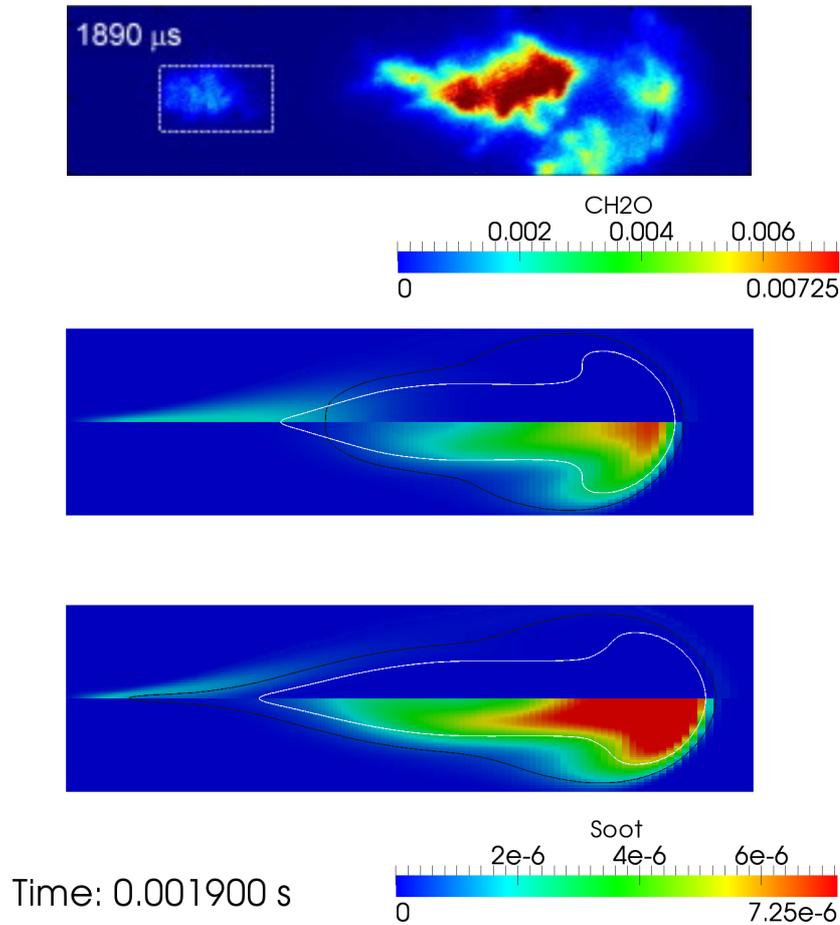


Figura 5.26: Rilevazioni PLIF di formaldeide (riquadro bianco tratteggiato) e PAH a 0.0019 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Dopo 0.4 ms la fine dell'iniziazione, la formaldeide è ormai completamente consumata, come anche nelle rilevazioni PLIF, sia con il meccanismo cinetico Luo-Lu che con il Faravelli: è interessante notare come solo il caso con schema cinetico Faravelli presenti reazioni ad alta temperatura sviluppate fino all'ugello dell'iniettore, mentre il consumo di formaldeide nel caso Luo-Lu è associabile al progressivo impoverimento della regione in cui si erano sviluppate le reazioni a bassa temperatura, con il conseguente avanzamento della conversione di CH_2O che viene via via ossidata.

Il soot mantiene sostanzialmente la stessa morfologia presentata nel confronto precedente, continuando ad avere una buona corrispondenza tra il campo di PAH rilevato e i campi di $\rho_s f_v$ calcolati con i due meccanismi cinetici considerati e il modello di Moss.

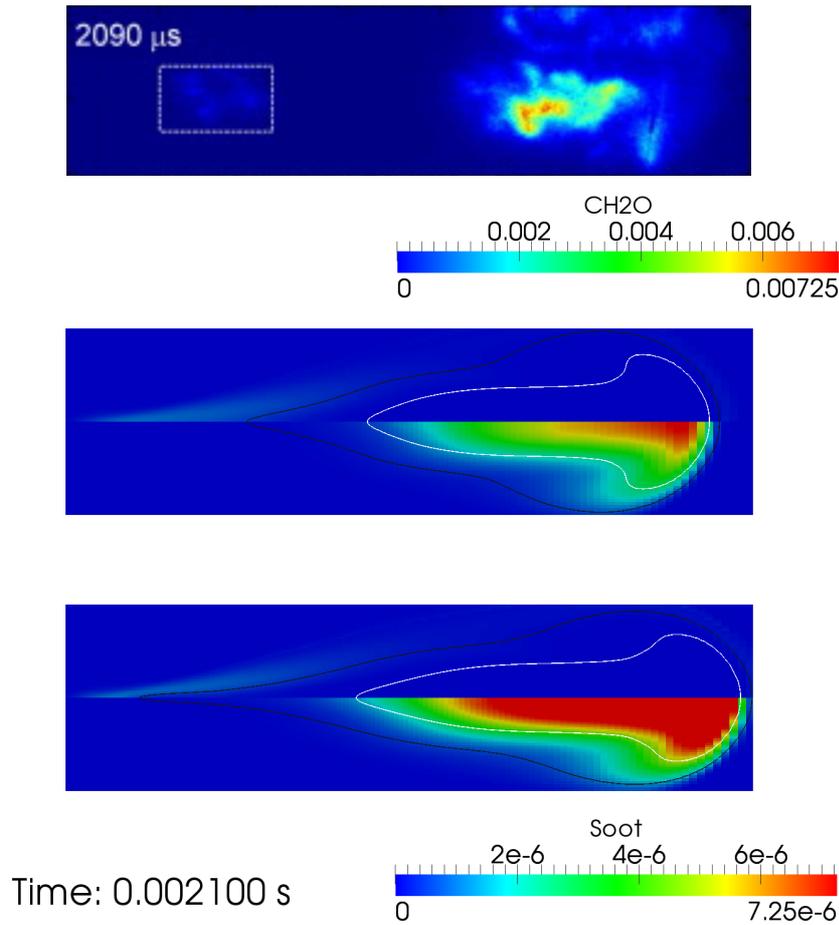


Figura 5.27: Rilevazioni PLIF di formaldeide (riquadro bianco tratteggiato) e PAH a 0.0021 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Il confronto 0.6 ms dopo la fine dell'iniezione certifica la completa ossidazione della formaldeide, che rimane solo in tracce nella regione in prossimità dell'iniettore, rilevabile anche nei campi PLIF.

Dalla rilevazione di PAH si può affermare che il fenomeno di ossidazione degli idrocarburi policiclici aromatici, ma più in generale del soot, ha già iniziato a prendere piede: il modello di soot utilizzato in questo lavoro sovrastima il tempo necessario all'instaurarsi dell'ossidazione, senza però inficiare sensibilmente la struttura generale che rimane comunque allineata al campo sperimentale di PAH.

La fase di first-stage ignition e il fenomeno di accensione che porta al moto di recessione e al conseguente consumo dei prodotti intermedi che si erano formati durante la fase di combustione a bassa temperatura, sono quindi colti, nel complesso, con precisione, fornendo quindi un'ulteriore prova della bontà del modello mRIF.

In figura 5.28 è riportato il confronto tra la massa di soot misurato sperimentalmente

e calcolate con il modello di Moss.

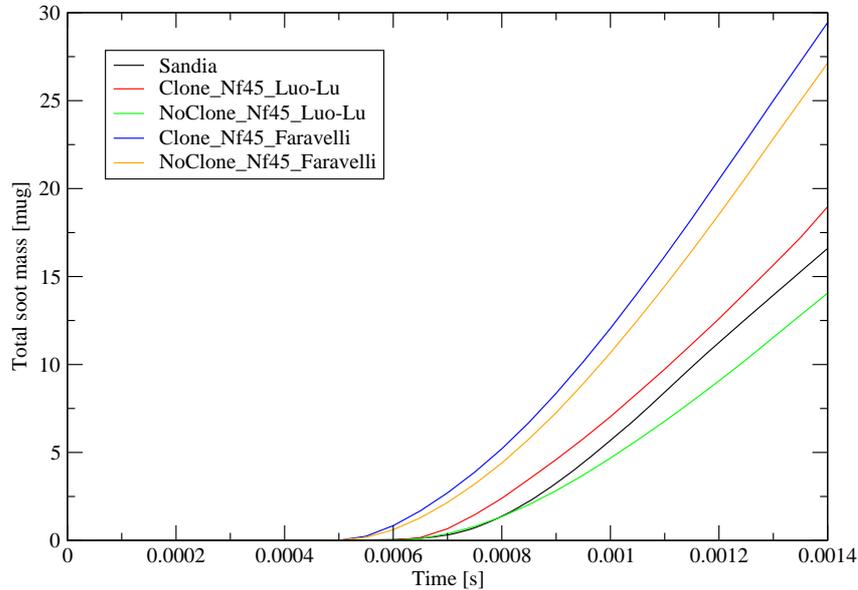


Figura 5.28: Confronto tra massa totale di soot sperimentale e calcolate.

Nonostante le rilevazioni sperimentali non comprendano la fase di stabilizzazione della massa di soot, di fondamentale importanza per una valutazione completa del fenomeno di formazione e ossidazione del particolato, si può affermare che il modello di Moss non solo garantisce una buona risoluzione qualitativa del posizionamento nel reattore ma consente anche una buona indicazione a livello quantitativo della massa di soot formato durante il processo di combustione.

In conclusione, si può affermare che il modello mRIF con criterio di suddivisione basato sulla massa di combustibile iniettato ha confermato risultati, in termini di struttura di fiamma, accurati. L'utilizzo di un elevato numero di flamelet accoppiato al criterio di inizializzazione NoClone permette di avere, almeno per lo schema cinetico Faravelli, una legge di rilascio del calore con picco legato alla fase premiscelata e assenza di oscillazioni, dovute all'accensione in sequenza dei diversi domini flamelet, cogliendo inoltre la struttura e il posizionamento della first-stage ignition e del particolato.

5.2 Tecniche di riduzione dei tempi di calcolo

Vengono ora presentate tre differenti tecniche, sviluppate e implementate in questo lavoro, atte a ridurre l'onere computazionale delle simulazioni mRIF: si è potuto notare infatti che all'aumentare del numero di flamelet utilizzati aumentano le ore di calcolo, aggravate

dall'aumento proporzionale del numero di sistemi ODE e delle β -PDF da integrare, fasi per altro particolarmente time expensive.

5.2.1 Virtual Species

La riduzione dei tempi di calcolo ottenuta con l'utilizzo dell'algoritmo ISAT accoppiato con i metodi di riduzione dei meccanismi cinetici DAC o DGR è sì consistente ma non è sufficiente qual'ora si utilizzino modelli mRIF con elevato numero di flamelet: l'integrazione di numerose β -PDF per un elevato numero di specie chimiche risulta infatti insostenibile. L'utilizzo dell'approccio *Virtual Species* si muove per l'appunto nell'ottica di ridurre i tempi di calcolo dell'integrazione delle β -PDF: quest'approccio prevede l'introduzione di un set ridotto di specie chimiche, N_2 , O_2 , CO_2 , H_2O , CO , H_2 , e *fuel*, del quale viene calcolata la distribuzione $\widetilde{Y}_{v,i}(\vec{x}, t)$ nel dominio CFD, integrando quindi le β -PDF, a partire dalla distribuzione delle stesse specie chimiche nel dominio flamelet $Y_{v,i}(Z, t)$ calcolata a partire dalla soluzione $Y_i(Z, t)$ del meccanismo completo, assicurando la conservazione della massa e delle proprietà termodinamiche tra la soluzione con set di specie chimiche ridotto e completo dal quale è possibile calcolare la distribuzione di temperatura in ogni cella del dominio fisico.

In figura 5.29 è riportato la struttura del modello RIF con integrato il *Virtual Species*, in modo da chiarire dove questo approccio interviene all'interno di ogni iterazione.

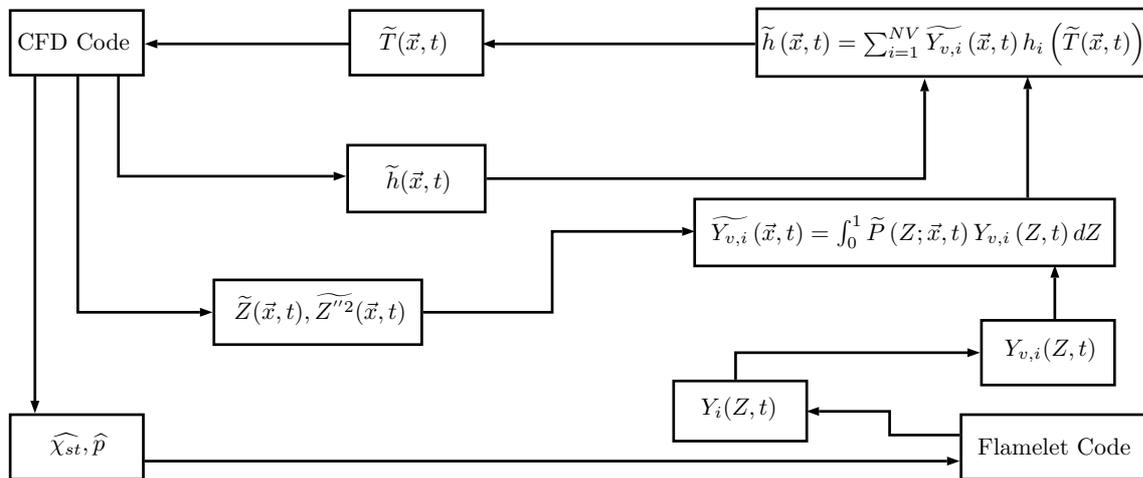


Figura 5.29: Struttura del Representative Interactive Flamelet model con approccio *Virtual Species*.

L'approccio *Virtual Species* prevede la risoluzione di un sistema di sette equazioni algebriche, avente per incognite il vettore delle frazioni massiche $Y_{v,i}(Z)$ delle sette specie chimiche prese in considerazioni. Il sistema di equazioni è da risolversi per ogni cella del dominio flamelet, in modo da valutare la composizione virtuale del set ridotto di specie chimiche: il sistema è composto da 4 equazioni di conservazione delle specie atomiche (C , H , O , N), dal vincolo che la somma delle frazioni molari sia pari a 1, dall'equazione di

conservazione dell'entalpia e dall'equazione di conservazione del calore specifico a pressione costante, che vengono ora riportate

$$\sigma_H(Z) = \sum_{i=1}^{NS} N_{H,i} x_i(Z) = \sum_{k=1}^{NV} N_{H,k} x_{v,k}(Z) \quad (5.4)$$

$$\sigma_C(Z) = \sum_{i=1}^{NS} N_{C,i} x_i(Z) = \sum_{k=1}^{NV} N_{C,k} x_{v,k}(Z) \quad (5.5)$$

$$\sigma_O(Z) = \sum_{i=1}^{NS} N_{O,i} x_i(Z) = \sum_{k=1}^{NV} N_{O,k} x_{v,k}(Z) \quad (5.6)$$

$$\sigma_N(Z) = \sum_{i=1}^{NS} N_{N,i} x_i(Z) = \sum_{k=1}^{NV} N_{N,k} x_{v,k}(Z) \quad (5.7)$$

$$\sum_{k=1}^{NV} x_{v,k}(Z) = 1 \quad (5.8)$$

$$h(Z) = \sum_{i=1}^{NS} Y_i(Z) h_i(T(Z)) = \sum_{k=1}^{NV} Y_{v,k}(Z) h_k(T(Z)) \quad (5.9)$$

$$c_p(Z) = \sum_{i=1}^{NS} Y_i(Z) c_{p,i}(T(Z)) = \sum_{k=1}^{NV} Y_{v,k}(Z) c_{p,k}(T(Z)) \quad (5.10)$$

dove con $N_{j,m}$ è indicato il numero di atomi della specie atomica j -esima presenti nella specie chimica m -esima, h_m è l'entalpia termochimica della specie m -esima, con NS è indicato il numero di specie chimiche che compongono il meccanismo cinetico completo mentre con NV è indicato il numero di specie chimiche che costituiscono il set ridotto.

Per $Z > 4Z_{st}$, quindi per miscela molto ricca, il sistema di equazioni viene ulteriormente ridotto imponendo

$$x_{v,CO_2}(Z) = 0 \quad (5.11)$$

e rendendo così non necessaria l'equazione di conservazione del calore specifico a pressione costante.

Per quanto riguarda la riduzione dei tempi di calcolo, l'utilizzo dell'approccio *Virtual Species* permette di abbattere fino al 50% le ore di calcolo: la riduzione si fa più significativa qual'ora il meccanismo cinetico utilizzato sia formato da un numero elevato di specie chimiche, si faccia uso di numerosi flamelet e la mesh del dominio CFD abbia molte celle, ma il vantaggio è comunque consistente anche in condizioni diametralmente opposte.

5.2.2 Frozing

La seconda tecnica di riduzione dei tempi di calcolo sviluppata in questo lavoro va sotto il nome di frozing dei flamelet ed è stata implementata nel solver `RIFdieselFoamFroze`.

Alla base di questo approccio, che si può facilmente intuire si propone di congelare la soluzione dei domini chimici al fine di poter evitare di risolvere il sistema ODE per il termine sorgente legato alle reazioni chimiche, vi sono tre fondamentali osservazioni:

- la composizione e il profilo di temperatura nei domini flamelet tende asintoticamente alle condizioni di equilibrio, definite dalle condizioni iniziali e dall'evoluzione temporale di \widehat{p} e $\widehat{\chi}_{st,l}$
- il termine di diffusione nei domini chimici, funzione di $\chi(Z, t)$, va via via scomparendo al diminuire di $\widehat{\chi}_{st,l}$
- nel caso di reattori a volume costante, legge di iniezione breve e basso scambio termico con l'ambiente esterno, la pressione media cessa di aumentare raggiunta la completa conversione del combustibile iniettato

Stando quindi a queste considerazioni, raggiunte le condizioni di equilibrio del dominio flamelet la soluzione cessa di variare nel tempo, eccezion fatta per le equazioni del modello di soot. Il punto ora è definire quando, entro i limiti dell'approssimazione che si ritiene accettabile, si può ritenere che la soluzione abbia raggiunto la condizione di equilibrio. Per fare questo si è definita una grandezza appropriata che rappresenti il tasso di avanzamento del dominio chimico: in letteratura sono presenti numerose varianti per questa grandezza, tipicamente chiamata progress variable e indicata con c , utilizzata in svariate situazioni, ma si è comunque preferito definirne una *ex novo* per andare incontro alle particolari esigenze del caso. Giunti alla conclusione che una progress variable definita a partire dalla sola soluzione dell'equazione della temperatura nel dominio flamelet sia da preferirsi rispetto alla tipica definizione funzione del tasso di produzione e distruzione di determinate specie chimiche nel dominio flamelet, c è stata valutata come

$$c(t) = \frac{\frac{\partial}{\partial t} \int_Z T(Z, t) dZ}{\int_Z T(Z, t = t_{SOI}) dZ} \quad (5.12)$$

Ora non resta che definire il valore di soglia di c_l e $\widehat{\chi}_{st,l}$ al di sotto del quale si può considerare che la soluzione abbia raggiunto la condizione di equilibrio: è evidente che tale valore deve essere sufficientemente basso per evitare di incorrere in pesanti errori, ma allo stesso tempo è importante che sia abbastanza elevato da poter effettivamente beneficiare dell'effetto di congelamento delle soluzioni nei domini flamelet.

A titolo esemplificativo, si presenta ora in estrema sintesi un caso applicativo dell'approccio freezing: per l'occasione si è scelto un caso Spray A con criterio di inizializzazione NoClone 45 flamelet, meccanismo cinetico Luo-Lu con *Virtual Species*.

In figura 5.30 è riportata l'evoluzione nel tempo della temperatura massima nei diversi domini flamelet: come già sottolineato in precedenza, si può notare come per ogni flamelet, cessato l'effetto diffusivo legato allo scalar dissipation rate e con pressione media nel vessel all'incirca costante, la temperatura massima raggiunge il valore imposto dall'equilibrio,

che è sì legato ad aspetti termodinamici ma è anche influenzato dall'evoluzione dei campi turbolenti in camera.

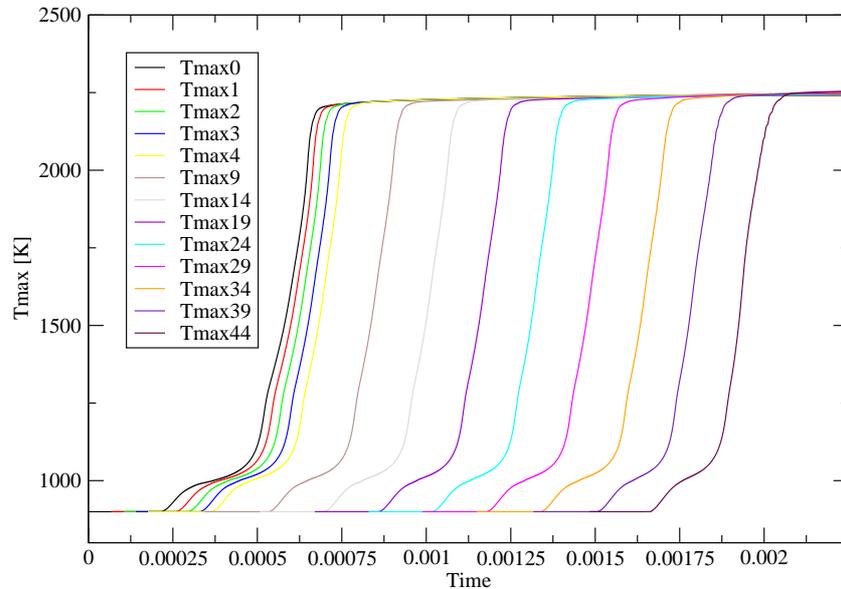


Figura 5.30: Evoluzione della temperatura massima dei domini flamelet.

In figura 5.31 è riportata invece l'evoluzione nel tempo dei $\widehat{\chi_{st,l}}$ per diversi flamelet: anche in questo caso si può notare una certa regolarità nella storia dei ChiStMean che decrescono rapidamente sotto il valore di 2.5 1/s, valutato come soglia limite per permettere il frozing del flamelet.

In figura 5.32 sono riportati i valori delle progress variable in funzione del tempo: come era lecito aspettarsi, la regolarità dei ChiStMean e le condizioni iniziali identiche per tutti i flamelet comportano una buona regolarità anche della storia evolutiva delle progress variable.

Durante questo lavoro si è potuto verificare che il valore soglia della progress variable appropriato per evitare grossolani errori sulla risoluzione della struttura di fiamma e delle grandezze di interesse ma allo stesso tempo avere una sensibile riduzione dei tempi di calcolo deve essere ricercato tra 25 e 45 1/s.

Per concludere, in figura 5.33 è riportata la successione degli eventi di frozing per il caso considerato: dopo il primo evento, avvenuto dopo 1.65 ms l'inizio dell'iniezione, si susseguono, con frequenza paragonabile agli eventi di generazione dei nuovi flamelet, numerosi altri eventi, che per simulazioni molto lunghe possono interessare tutti i flamelet generati.

Per quanto riguarda la riduzione dei tempi di calcolo, l'utilizzo dell'approccio frozing

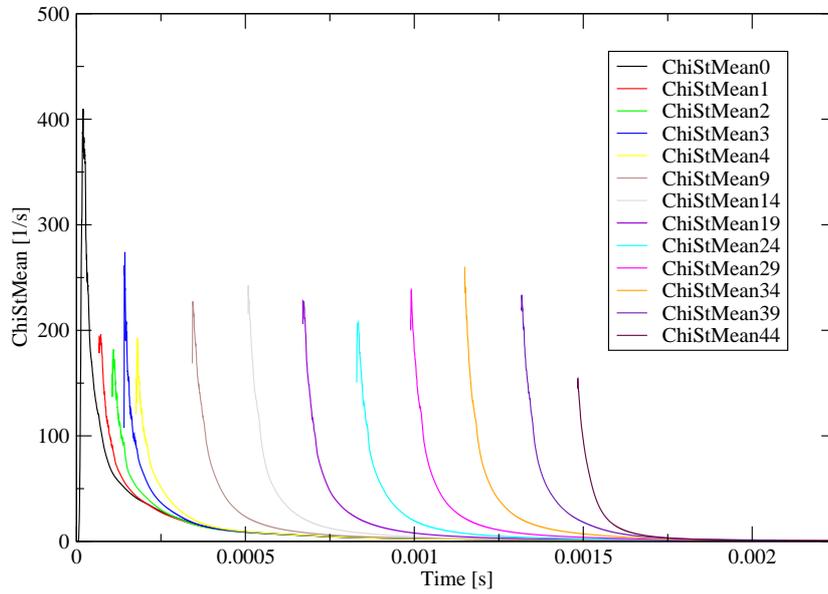


Figura 5.31: Evoluzione degli scalar dissipation rate stechiometrico medio.

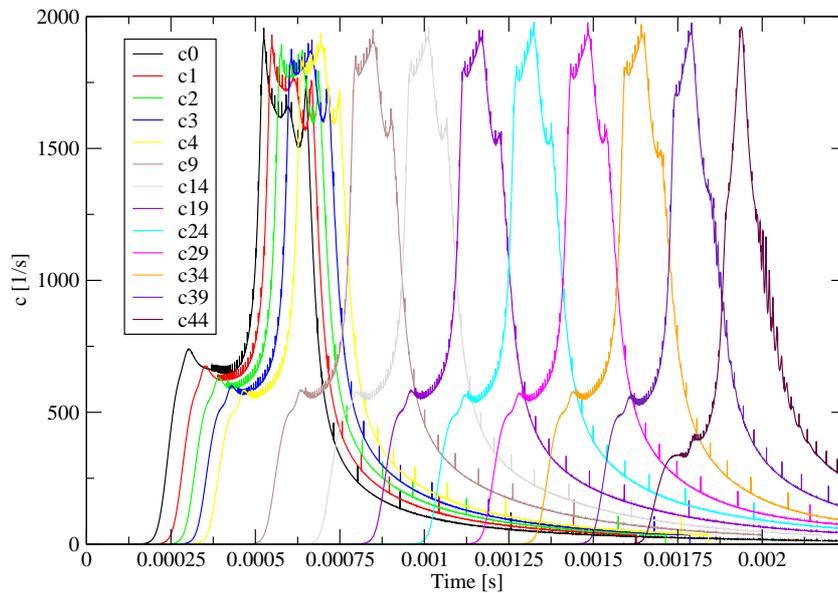


Figura 5.32: Evoluzione delle progress variable dei domini flamelet.

garantisce un risparmio in termini di ore di calcolo che dipende fortemente dalla complessità del meccanismo cinetico utilizzato, dal numero di flamelet, dal criterio di inizializzazione

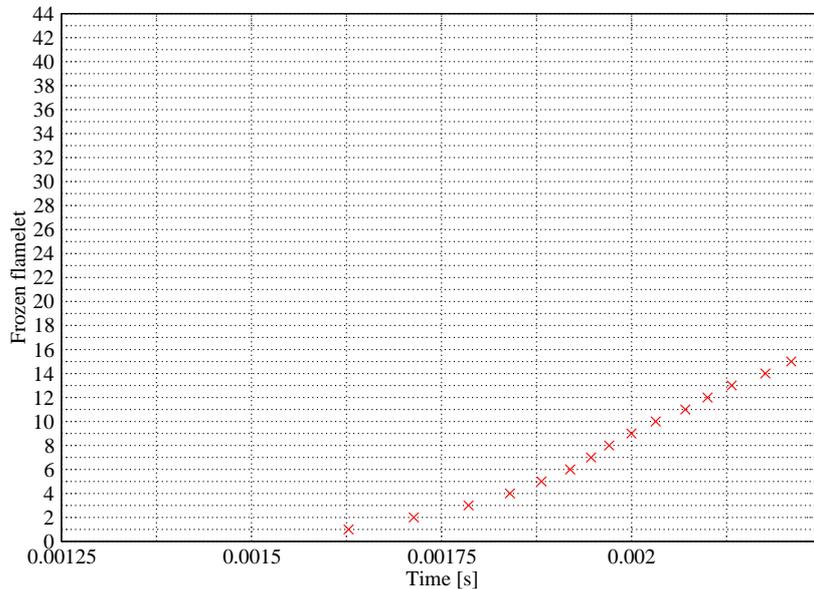


Figura 5.33: Successione degli eventi di frozing dei domini flamelet.

e soprattutto dall'intervallo di tempo a partire dal SOI che si vuole simulare, ma si può comunque affermare che in condizioni simili a quelle del caso appena studiato l'utilizzo di questa tecnica permette di ridurre tra il 10% e il 20% le ore di calcolo necessarie a simulare circa 2.5 ms con approccio *Virtual Species*.

5.2.3 Merging

La terza tecnica di riduzione dei tempi di calcolo sviluppata in questo lavoro va sotto il nome di merging dei flamelet ed è stata implementata nel solver `RIFdieselFoamMerge`.

Come si è potuto notare nelle pagine precedenti, l'utilizzo di numerosi flamelet permette di cogliere con precisione le variazioni nella turbulence-chemistry interaction che insorgono nell'intero processo. Non volendo rinunciare ai benefici portati dall'utilizzo di un numero spinto di flamelet e consci dell'aggravio in termini di onere computazionale che esso comporta, si è pensato la fusione, al momento giusto, di flamelet con storia evolutiva simile potesse abbattere i tempi di calcolo legati alla risoluzione dei sistemi ODE delle reazioni chimiche e dell'integrazione delle β -PDF.

Il merging dei flamelet richiede la definizione di appropriate grandezze che indichino quanto le soluzioni di due flamelet, il flamelet master che rimarrà attivo dopo l'evento di merging e che si prenderà carico della mixture fraction del flamelet slave che verrà disattivato durante il merging, siano effettivamente paragonabili. Tra le possibili combinazioni di proprietà termodinamiche dei diversi domini flamelet si è verificato che l'utilizzo di un

set di quattro condizioni e quattro valori di soglia attentamente valutati sono sufficienti ad evitare la comparsa di grossolane differenze tra le soluzioni calcolate con e senza merging: le quattro condizioni scelte e implementate sono

$$|\widehat{\chi_{st,M}} - \widehat{\chi_{st,S}}| < \Delta \widehat{\chi_{st}} \quad (5.13)$$

$$|\max(T_M(Z, t)) - \max(T_S(Z, t))| < \Delta \max(T) \quad (5.14)$$

$$\left| 2 \frac{\int_Z h_M(Z, t) dZ - \int_Z h_S(Z, t) dZ}{\int_Z h_M(Z, t) dZ + \int_Z h_S(Z, t) dZ} \right| < \Delta h \quad (5.15)$$

$$\left| 2 \frac{\int_Z \frac{h_M}{T_M}(Z, t) dZ - \int_Z \frac{h_S}{T_S}(Z, t) dZ}{\int_Z \frac{h_M}{T_M}(Z, t) dZ + \int_Z \frac{h_S}{T_S}(Z, t) dZ} \right| < \Delta \frac{h}{T} \quad (5.16)$$

dove con M sono indicate le grandezze del flamelet master, con S quelle del flamelet slave, Δ sono i valori di soglia e h è l'entalpia sensibile calcolata nel dominio flamelet.

Si ricorda inoltre che assieme alle condizioni di merging scelte, l'efficacia di questo approccio, alla stregua di quello che accade anche con il frozing, è fortemente influenzato da una corretta valutazione dei valori di soglia che si adoperano: in tabella 5.3 sono riportati i valori di soglia minimi e massimi che si è potuto verificare garantiscano contemporaneamente l'accuratezza della soluzione ottenuta e un significativo beneficio in termini di ore di calcolo risparmiate.

	min	max
$\Delta \widehat{\chi_{st}}$	0.25	0.75
$\Delta \max(T)$	0.0675	0.1
Δh	0.005	0.0095
$\Delta \frac{h}{T}$	0.004	0.009

Tabella 5.3: Range dei valori di soglia utilizzati per il merging dei flamelet.

Come per il frozing, si presenta ora in figura 5.34, a titolo esemplificativo, l'evoluzione degli eventi di merging nello stesso caso Spray A utilizzato per la presentazione del frozing.

Per quanto riguarda la riduzione dei tempi di calcolo, l'utilizzo dell'approccio merging permette di abbattere fino al 40% le ore di calcolo necessarie per simulare 2.5 ms con approccio *Virtual Species*, con percentuali che possono superare anche il 50% qual'ora si utilizzino valori di soglia particolarmente spinti.

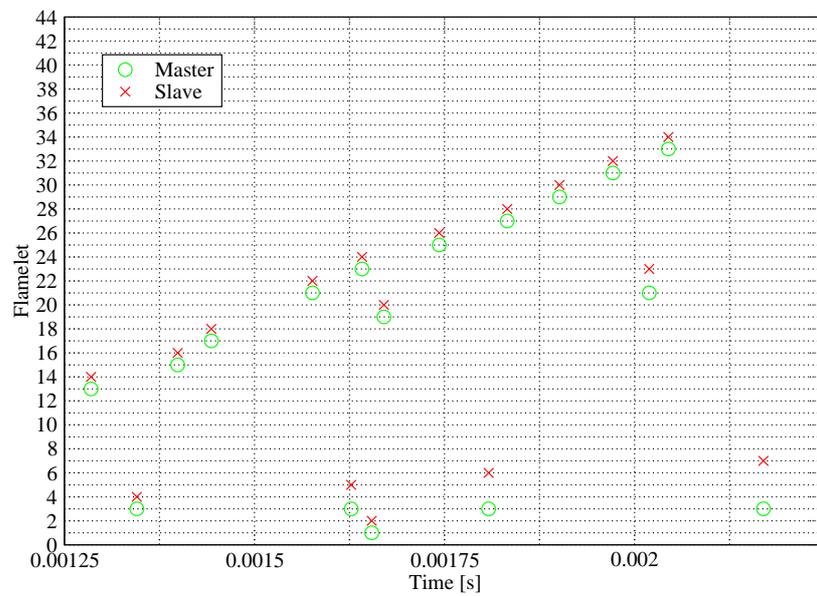


Figura 5.34: Successione degli eventi di merging dei domini flamelet.

Capitolo 6

Il modello mRIF e i motori Diesel

In questo capitolo verranno presentati i risultati delle simulazioni svolte durante questo lavoro con lo scopo di investigare il comportamento del modello mRIF applicato ai casi motore, più provante rispetto ai casi bomba a causa delle complessità introdotte dal moto della carica, dal volume variabile, dall'interazione a parete e leggi di iniezione complesse.

In sintesi, le prove in bomba e motore analizzate in questo capitolo riguarderanno:

- lo studio delle capacità del modello nel predire la struttura di fiamma nel caso di leggi di iniezione complesse
- il confronto tra caso motore e caso in bomba equivalente
- lo studio dell'influenza della qualità della mesh del dominio CFD

6.1 Legge di iniezione multipla

La prima analisi presentata vuole investigare il comportamento del modello mRIF nel caso di iniezioni multiple: lo sviluppo di sistemi di iniezione sempre più flessibili e precisi ha permesso il contemporaneo sviluppo di leggi di iniezione sempre più complesse, in modo da limitare il rumore prodotto dal processo di combustione, limitare le emissioni di inquinanti e migliorare le prestazioni del motore. I gradi di libertà che l'adozione di leggi di iniezione complesse fornisce sono numerosi (numero di iniezioni, suddivisione della massa di combustibile da iniettare con le diverse iniezioni, intervallo tra un'iniezione e l'altra) imponendo quindi l'utilizzo di modelli CFD, che risolvano accuratamente l'interazione tra gli spray di combustibile, in fase di progettazione e sviluppo.

Skeen in [46] presenta, in completa analogia con quanto fatto in [3] per il caso con iniezione singola da 1.5 ms, le rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH accoppiate con immagini schlieren ad alta velocità e rilevazioni di chemiluminescenza. Le condizioni termodinamiche e l'iniettore sono le stesse del caso Spray A analizzato nel capitolo precedente: i due casi differiscono quindi per la sola legge di iniezione, riportata in figura 6.1, che mantiene

la stessa portata di combustibile iniettata presentando però due iniezioni da 0.5 ms separate da una pausa di 0.5 ms (0.5/0.5-dwell/0.5 ms). La massa di combustibile iniettata è quindi indicativamente i 2/3 di quella iniettata nel caso Spray A presentato nel Capitolo 5, equamente distribuita tra le due iniezioni.

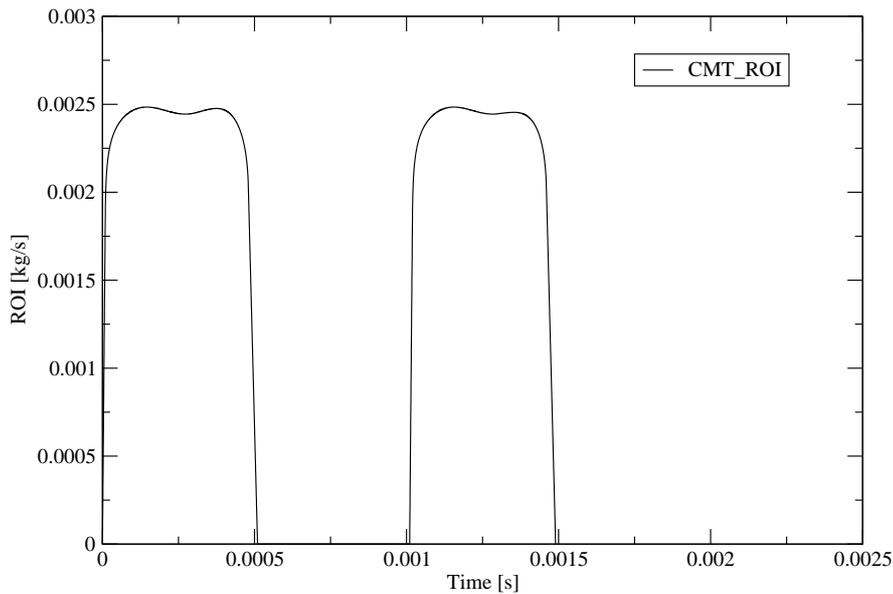


Figura 6.1: Legge di iniezione generata utilizzando l'utility sviluppata dal CMT.

Prima di iniziare a presentare i risultati è importante evidenziare come le rilevazioni presentate da Skeen risultano in qualche modo anomale: l'ignition delay della prima iniezione rilevato durante le prove sperimentali risulta inferiore rispetto al caso con iniezione da 1.5 ms. Vista la sostanziale analogia tra le due prove sperimentali, è lecito aspettarsi che l'ignition delay delle due prove siano comparabili: lo stesso Skeen in [46] afferma che le prove con iniezione multipla potrebbe essere affette da variazioni sulla corretta composizione iniziale della miscela ossidante nel vessel o dalla presenza di perossidi nel serbatoio di normal-dodecano. L'analisi qui presentata non ha però l'ambizione di cogliere esattamente l'evoluzione temporale dell'intero processo, cosa per altro non realizzata con precisione nemmeno nel caso di iniezione singola da 1.5 ms, permettendo quindi di continuare questa analisi confrontando quindi le principali caratteristiche della struttura di fiamma rilevate durante le prove sperimentali e calcolate con i meccanismi cinetici Luo-Lu e Faravelli utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone con 15 flamelet per iniezione.

In figura 6.2, 6.3, 6.4 e 6.5 sono riportati i confronti tra rilevazione di chemiluminescenza e campo di temperatura calcolato con i due meccanismi cinetici.

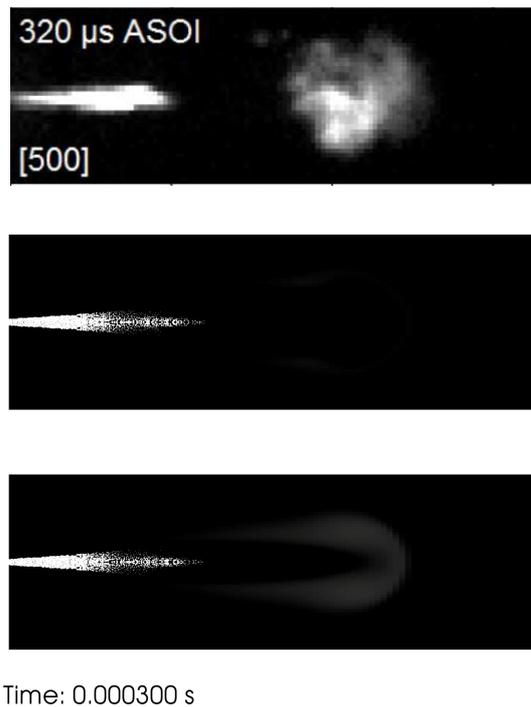


Figura 6.2: Chemiluminescenza (prima immagine) a 0.3 ms e campo di temperatura (soglia superiore posta a 1500 K) calcolato utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) con criterio di inizializzazione NoClone.

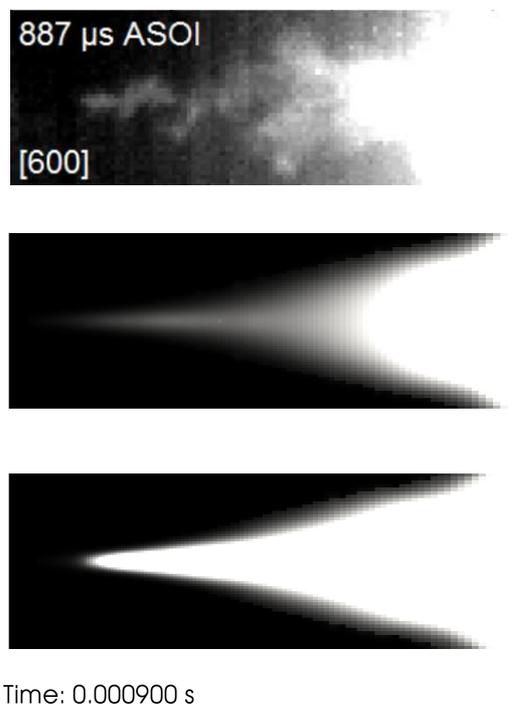


Figura 6.3: Chemiluminescenza (prima immagine) a 0.9 ms e campo di temperatura (soglia superiore posta a 1500 K) calcolato utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) con criterio di inizializzazione NoClone.

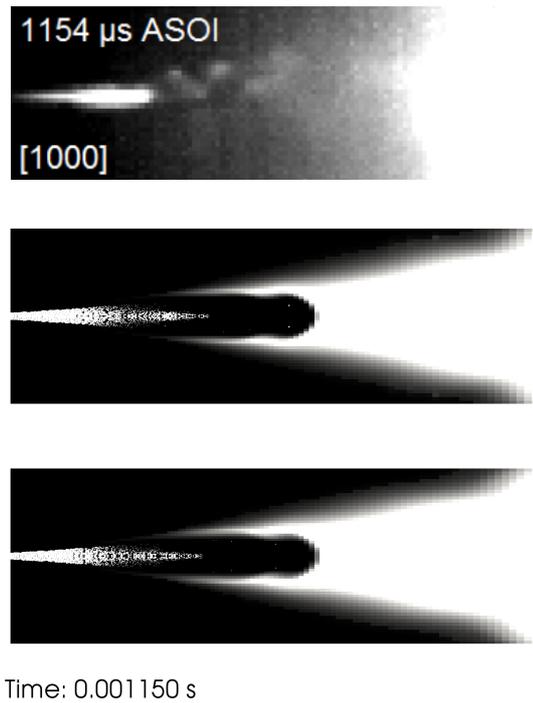


Figura 6.4: Chemiluminescenza (prima immagine) a 1.15 ms e campo di temperatura (soglia superiore posta a 1500 K) calcolato utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) con criterio di inizializzazione NoClone.

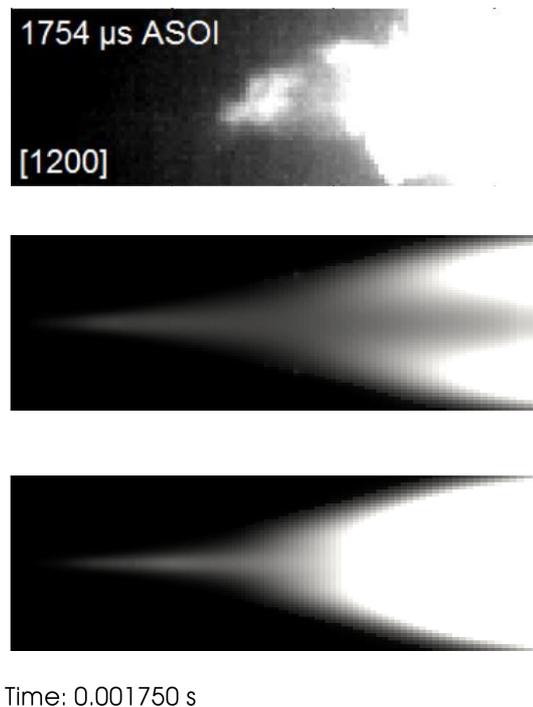


Figura 6.5: Chemiluminescenza (prima immagine) a 1.75 ms e campo di temperatura (soglia superiore posta a 1500 K) calcolato utilizzando il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) con criterio di inizializzazione NoClone.

Dalle immagini presentata si può concludere che:

- il confronto 0.3 ms dopo l'inizio della prima iniezione conferma la difficoltà nel cogliere l'ignition delay che, come si è potuto verificare nei capitoli precedenti, dipende in forte misura dallo schema cinetico utilizzato. Si ricorda inoltre che le prove sperimentali sono affette, probabilmente, da circostanze che hanno ridotto il ritardo all'accensione, peggiorando ulteriormente i risultati del confronto.
- dal confronto con le rilevazioni di chemiluminescenza 0.4 ms dopo la fine della prima iniezione, si può affermare che il fenomeno di recessione del fronte di fiamma verso l'ugello dell'iniettore viene colto con precisione da entrambe le simulazioni.
- il confronto 0.15 ms dopo l'inizio della seconda iniezione mostra la testa dei vapori di combustibile della seconda iniezione, ancora a bassa temperatura, penetrare nella zona di recessione del primo fronte di fiamma. Anche nelle rilevazioni di chemiluminescenza è presente questo fenomeno, rilevabile nelle perturbazioni a valle della penetrazione del liquido, ma con intensità inferiore: il motivo è da ricercarsi, probabilmente, in una incompleta risoluzione dell'interazione tra le strutture delle due iniezioni.
- il fenomeno di recessione del secondo fronte di fiamma, presentato nel confronto 0.25 ms dopo la fine della seconda iniezione, è colto anche in questo caso con buona precisione da entrambe le simulazioni. Il fenomeno di accensione della regione a bassa temperatura dopo la fine dell'iniezione, e la conseguente scomparsa dello strain rate che portava all'extinction nella regione di lift-off, è ben modellato, anche se con un pò di ritardo, grazie a una buona previsione del campo fluidodinamico e conseguentemente una corretta stima degli scalar dissipation rate stechiometrico medio e dell'accensione dei domini flamelet che rappresentano la regione a monte del lift-off.

Si passa ora a presentare, in analogia con quanto fatto nel Capitolo 5, il confronto con le rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH e i campi di frazione massica di formaldeide e $\rho_s f_v$, presentato in figura 6.6, 6.7, 6.8, 6.9, 6.10 e 6.11. L'interazione tra legge di iniezione multiple e first-stage ignition è uno degli aspetti più complessi da modellare, facendo di questa analisi un duro banco di prova del modello mRIF, utile ad investigarne i limiti e ad incentivare possibili miglioramenti.

Va ricordato inoltre che il confronto ora presentato risente del già citato ignition delay ridotto rispetto al caso con iniezione da 1.5 ms, ma, come detto in precedenza per il confronto con le rilevazioni di chemiluminescenza, l'aspetto fondamentale di questa analisi è studiare le capacità del modello mRIF di cogliere la struttura di fiamma delineata dalle rilevazioni sperimentali.

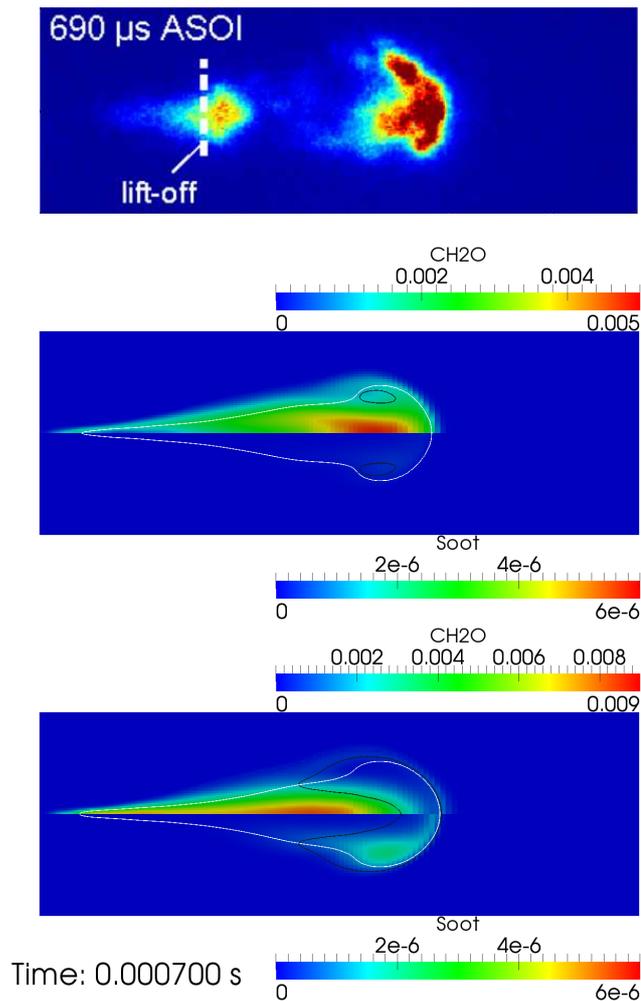


Figura 6.6: Rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH a 0.0007 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Il confronto 0.2 ms dopo la fine della prima iniezione conferma la difficoltà, già palesate nel caso di iniezione da 1.5 ms, di cogliere a pieno la velocità del moto di recessione del fronte di fiamma nel caso del meccanismo cinetico Faravelli o di modellare la transizione alla second-stage ignition nel caso Luo-Lu.

La soluzione con meccanismo cinetico Faravelli presenta, coerentemente con le rilevazioni sperimentali, la formazioni di soot in testa alla penetrazione del primo spray, nella regione ricca con temperatura superiore ai 1500 K.

Si può inoltre notare che la transizione da reazioni di bassa temperatura a quelle ad alta temperatura ha inizio nella regione periferiche della testa della penetrazione del vapore, coerentemente con quanto rilevato dalle immagini schlieren presentate sia in [3] che in [46], per poi coinvolgere l'intera testa dello spray.

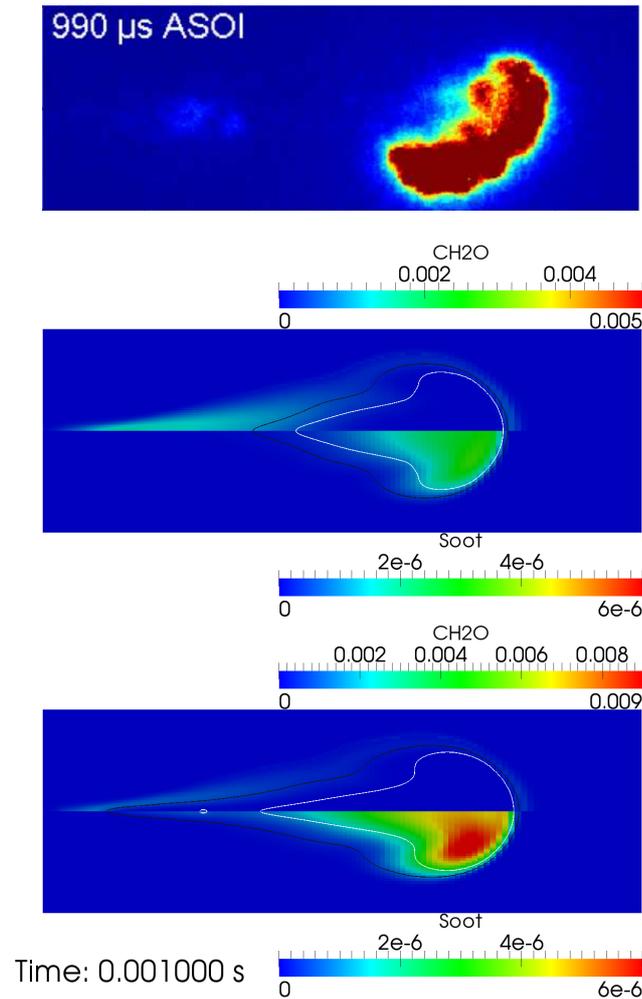


Figura 6.7: Rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH a 0.0010 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Dopo 0.5 ms dalla fine della prima iniezione, a ridosso quindi dell'inizio della seconda, la formaldeide prodotta dalle reazioni di bassa temperatura è ormai quasi completamente ossidata a causa del moto di recessione del fronte di fiamma. Allo stesso tempo si ha la formazione di idrocarburi policicli aromatici, e conseguentemente soot, in testa allo spray, coerentemente con quanto evidenziato dalle rilevazioni PLIF.

La soluzione con meccanismo cinetico Luo-Lu non presenta reazioni di alta temperatura in prossimità dell'ugello dell'iniettore: la causa è da cercarsi nell'eccessivo ritardo all'accensione ottenuto con questo schema cinetico che implica un ridotto intervallo di tempo disponibile per il fenomeno di recessione, che non si può quindi completare, comportando residui di formaldeide in una regione più estesa rispetto alla soluzione ottenuta con il meccanismo Faravelli.

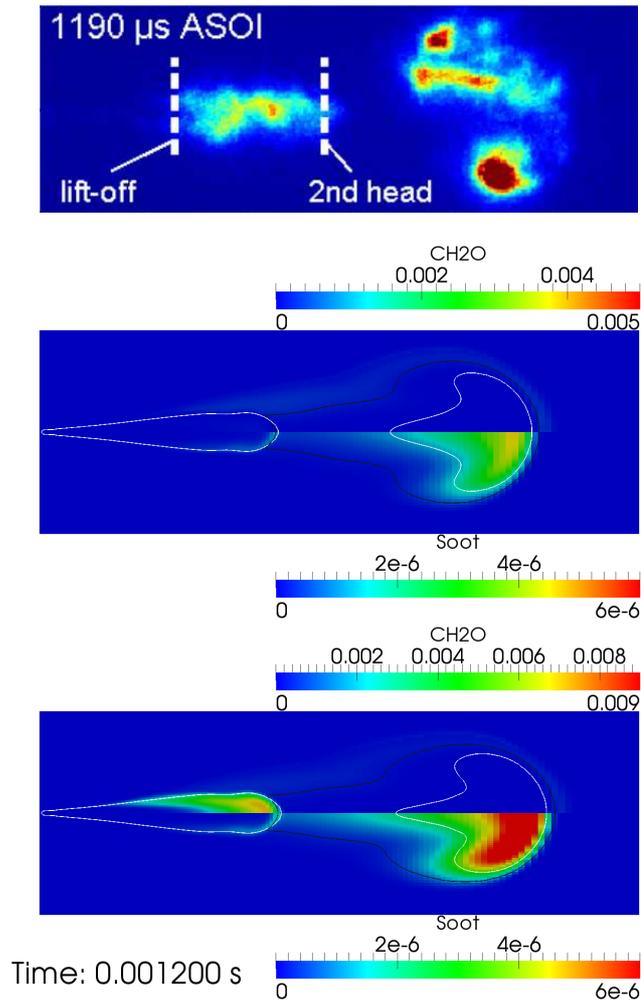


Figura 6.8: Rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH a 0.0012 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Dopo 0.2 ms l'inizio della seconda iniezione, si ha la formazione di formaldeide tra la testa e la regione di lift-off del secondo spray, laddove si ha l'incontro tra il secondo spray e la regione di reazione ad alta temperatura della prima iniezione. Solo la soluzione con meccanismo cinetico Faravelli presenta, con un discreto tempismo, la formazione della first-stage ignition, ritarda come di consuetudine dalla soluzione con meccanismo Luo-Lu.

La regione di sviluppo del soot coincide con la regione dove si rileva la presenza dei PAH, confermando le capacità del modello di soot di cogliere correttamente la zona in cui si forma il particolato.

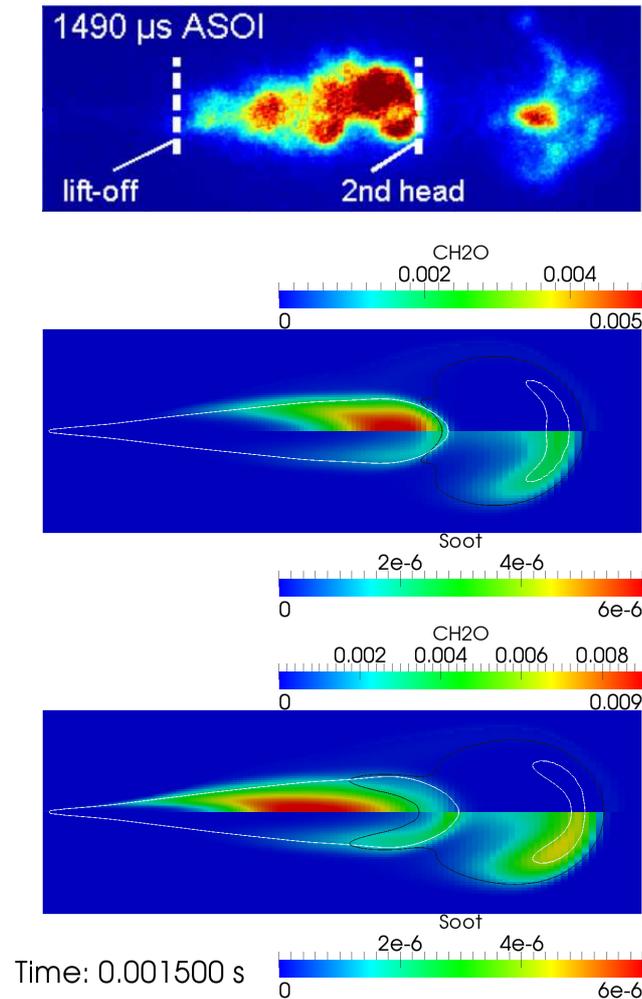


Figura 6.9: Rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH a 0.0015 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Finita la seconda iniezione, la regione di sviluppo di formaldeide si estende ora per oltre 20 mm, dalla regione di lift-off alla testa del secondo spray. Questa regione è ben risolta da entrambi i meccanismi considerati, con differente localizzazione del picco di CH_2O a causa dei differenti ignition delay.

Skeen in [46] si domanda se parte della fluorescenza tra 30 e 40 mm non sia in parte da attribuire ai PAH, vista l'intensità del segnale rilevato: la soluzione con il meccanismo cinetico Faravelli sembra dar manforte a questa osservazione, presentando proprio in questa regione la formazione di soot derivante dal combustibile iniettato con il secondo spray.

Contemporaneamente parte del soot prodotto a partire dalla prima iniezione di combustibile viene ossidato, così come parte dei PAH in testa al primo spray.

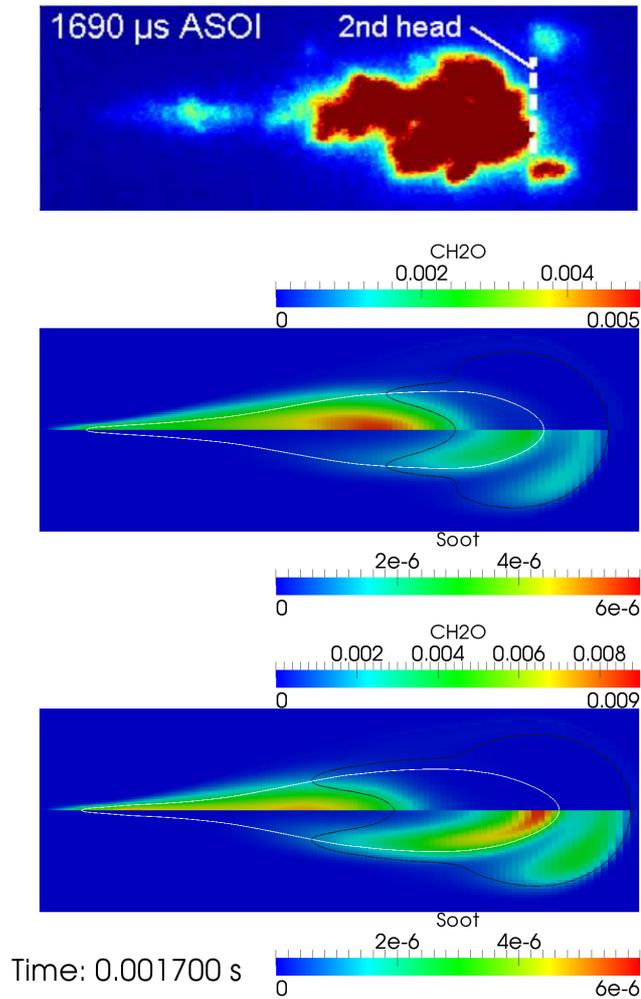


Figura 6.10: Rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH a 0.0017 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Terminata la seconda iniezione di combustibile, il fenomeno di recessione ha consumato in 0.2 ms la formaldeide fino a 20 mm dal nozzle dell'iniettore: ancora una volta la velocità con cui il fronte di fiamma si muove verso l'iniettore è inferiore rispetto a quella rilevata durante le prove sperimentali, con formaldeide che permane fino a 40 mm nella simulazione con schema cinetico Faravelli e quasi 50 mm in quella con lo schema Luo-Lu.

In testa alla fiamma, il particolato formato dal combustibile delle due iniezioni è ormai compenetrato, costituendo così una struttura unica. La regione di sviluppo del soot corrispondente alla seconda iniezione coincide, con buona approssimazione, con le rilevazioni PLIF di PAH, ormai attribuibile unicamente alle reazioni derivanti dal combustibile del secondo spray.

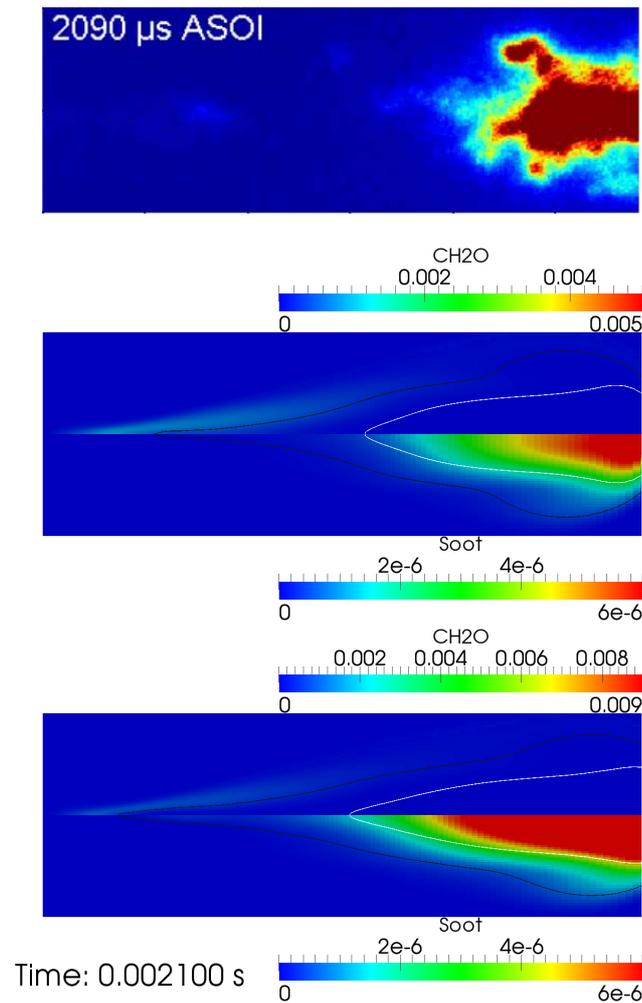


Figura 6.11: Rilevazioni PLIF di formaldeide e PAH a 0.0021 s (prima immagine), $\rho_s f_v$ (pannello inferiore) e frazione massica di CH_2O (pannello superiore) calcolati con il meccanismo cinetico Luo-Lu (seconda immagine) e Faravelli (terza immagine) utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Termina la seconda iniezione da 0.6 ms, il fenomeno di recessione ha consumato ormai completamente la formaldeide prodotta durante le reazioni di bassa temperatura, che permane solo in tracce al di fuori della regione delimitata dall'isolinea a 1500 K.

Il soot si concentra in testa allo spray coerentemente con quanto evidenziato nelle rilevazioni PLIF. Il soot stimato dal meccanismo cinetico Faravelli è superiore rispetto a quello calcolato con il meccanismo cinetico Luo-Lu: il motivo è da ricercarsi nella maggior reattività dello schema Faravelli che comporta livelli di acetilene (C_2H_2) superiori, precursore del soot utilizzato dal modello di Moss.

Per concludere questa analisi si presentano, in figura 6.1, le curve di rilascio del calore calcolate con i meccanismi cinetici Luo-Lu e Faravelli.

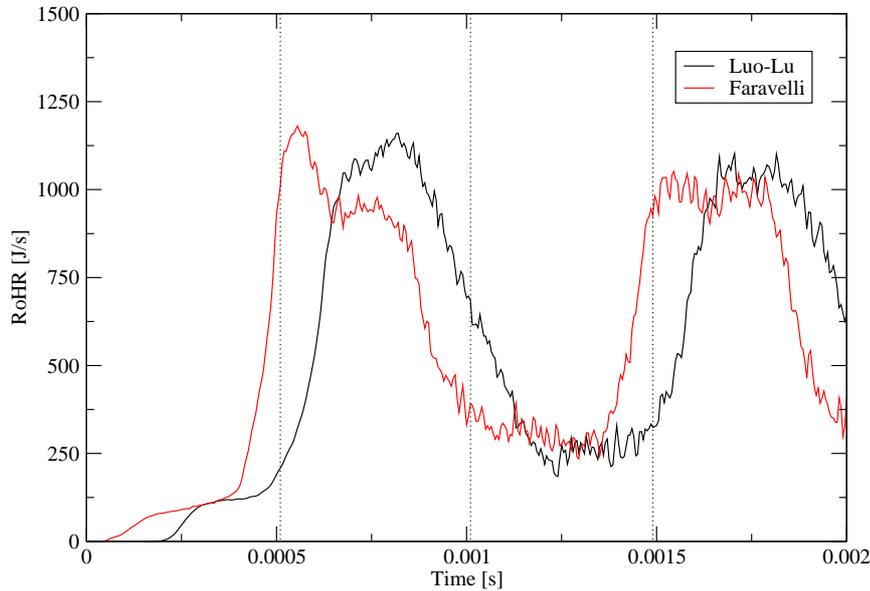


Figura 6.12: Legge di rilascio del calore calcolate con i meccanismi cinetici Luo-Lu e Faravelli.

La prima valutazione che salta agli occhi è il ridotto ritardo all'accensione del meccanismo Faravelli rispetto al Luo-Lu, ma di questo si è già discusso in precedenza. Anche la presenza del picco di rilascio del calore in fase premiscelata, rilevata nel capitolo precedente dalle curve di pressione per il caso Spray A con iniezione da 1.5 ms, per il solo meccanismo Faravelli è legata alla maggior reattività del meccanismo Faravelli rispetto al meccanismo Luo-Lu.

Skeen in [46] presenta il confronto tra ignition delay delle due iniezioni, che coerentemente con i modelli fenomenologici, risulta inferiore per la seconda iniezione, incontrando temperature elevate e prodotti intermedi di reazioni del primo spray di combustibile.

I risultati ottenuti sia con il meccanismo cinetico Luo-Lu che con quello Faravelli non presentano la diminuzioni di quasi il 50% rilevata da Skeen in [46], ma diminuiscono di quasi il 10%. Il motivo alla base di questa non completa risoluzione è causata dalla mancanza di interazione in termini di massa ed energia tra i due spray, che interagiscono unicamente attraverso l'accoppiamento fluidodinamico.

Risulta quindi fondamentale studiare un modello di interazione tra i flamelet che riesca a cogliere l'interazione anche tra flamelet di iniezioni differenti (il modello di interazione Attack non ha infatti restituito i benefici attesi, lasciando quindi spazio a studi futuri) o decidere di utilizzare un modello mRIF esteso, appositamente studiato per i casi con iniezioni multiple: per ulteriori dettagli si rimanda a [47] e [48].

6.2 Analisi dei risultati dei casi motore

In questo paragrafo verranno presentati i principali risultati delle simulazioni di casi motori con il solver `RIFdieselEngineDyMFoam`, il quale utilizza il modello RIF per risolvere il processo di combustione nei motori Diesel.

Le prove sono state svolte su due motori, un motore heavy duty [49] e un motore ottico [13]: in tabella 6.1 si presentano le principali caratteristiche dei motori mentre le mesh delle tazze al punto motore superiore sono proposte in figura 6.13.

	Heavy duty engine	Optical engine
Number of cylinders	6	1
Bore [mm]	128	139.7
Stroke [mm]	144	152.4
Compression ratio	17.5	11.2
Swirl ratio	1.4	0.5
Hole number	8	3
Nozzle hole diameter [mm]	0.2	0.09

Tabella 6.1: Caratteristiche dei motori analizzati in questo capitolo.

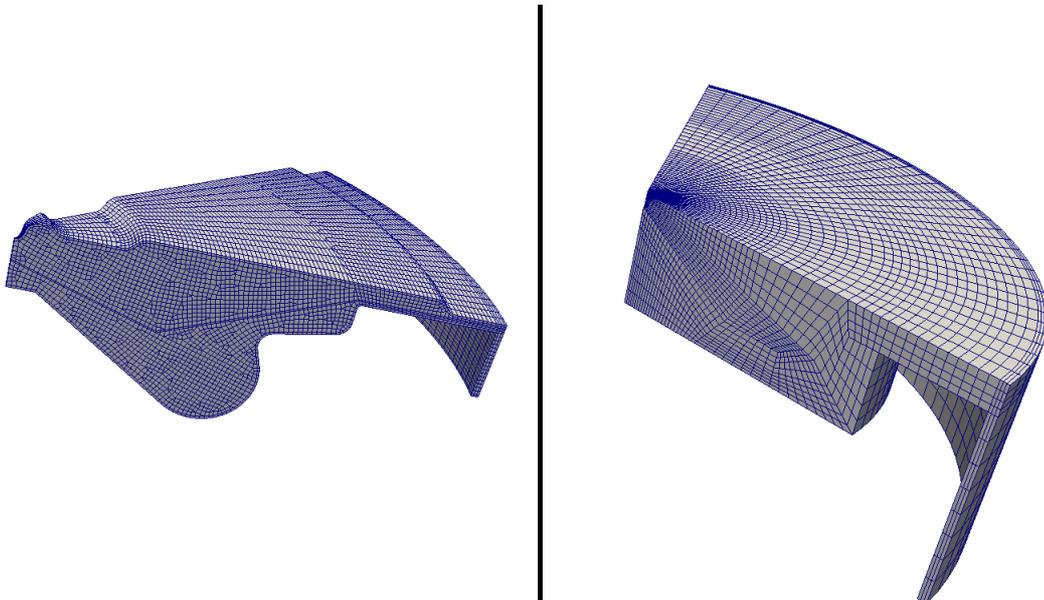


Figura 6.13: Mesh al punto morto superiore del motore heavy duty (a sinistra) e di quello ottico (a destra) studiati in questo paragrafo.

La mesh del motore heavy duty ha circa 35000 celle al punto morto superiore, rappresenta 1/8 dell'intero cilindro, è stata generata con un software commerciale ed è priva

di raffinamento nella regione dove si sviluppa lo spray e la fiamma, mentre la mesh del motore ottico è formata anch'essa da circa 35000 celle al TDC, è stata generata con un tool sviluppato dal gruppo di Motori a Combustione Interna del Politecnico di Milano, rappresenta 1/3 del cilindro ed è spray-oriented, con un infittimento quindi nella regione dello spray sia in direzione assiale che radiale rispetto alla direzione dell'iniezione.

L'analisi ora proposta sarà incentrata sul confronto tra caso motore e caso in bomba equivalente, analizzando le analogie tra i due casi e cercando le ragioni nelle inconsistenze, che si anticipa fin da ora sono legate, qual'ora presenti, ad un'incompleto accoppiamento lagrangiano-euleriano causato da una mesh non adeguatamente raffinata nella regione dello spray.

Le prove per il caso motore heavy duty sono state svolte al punto operativo B50, corrispondente a condizioni di carico parziale con consumi di combustibile intermedi e bassa produzione di soot, mentre il per il motore ottico si è scelto di simulare, tra le numerose condizioni operative fornite dal IFPEN [50] che ha portato avanti per conto dell'ECN un'ampia campagna sperimentale con questo motore ottico e un iniettore Spray B con tre fori, il punto operativo Spray A, con condizioni termodinamiche e legge di iniezione del tutto analoghe alle prove in bomba Spray A analizzate nel capitolo precedente: in tabella 6.2 sono riportate le condizioni termodinamiche per i due casi motore studiati, mentre in figura 6.14 è riportata la legge di iniezione del caso motore heavy duty.

	Heavy duty engine	Optical engine
Speed [RPM]	1600	1200
SOI [CAD ATDC]	-16	-2.59
EOI [CAD ATDC]	2.14	8.21
Injection duration [s]	0.00189	0.0015
p @ SOI [bar]	62.71	57.88
T @ SOI [K]	852.5	914
Y_{O_2} @ IVC	0.2192	0.1680
Y_{N_2} @ IVC	0.7641	0.8320
Y_{CO_2} @ IVC	0.0120	0
Y_{H_2O} @ IVC	0.0047	0

Tabella 6.2: Condizioni termodinamiche ed operative dei casi motore studiati.

Per il caso in bomba equivalente del motore heavy duty le condizioni iniziali nel vessel sono le stesse del motore al SOI (Start Of Injection): è evidente che la fase di compressione altera le condizioni termodinamiche nel cilindro, modificando quindi l'ignition delay e le lunghezze di penetrazione del liquido e del vapore, ma si può affermare che la struttu-

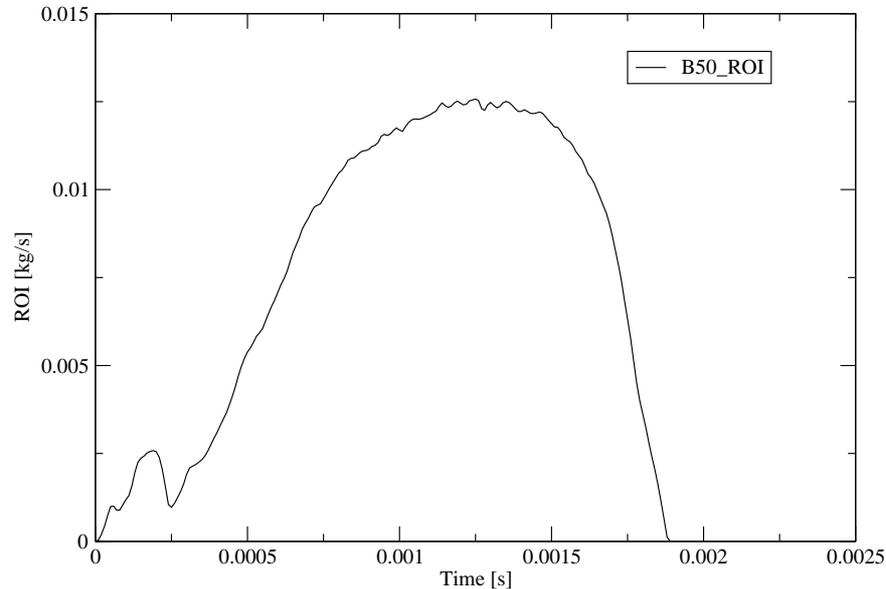


Figura 6.14: Legge di iniezione del caso motore heavy duty al punto operativo B50.

ra di fiamma non viene stravolta dall'innalzamento di temperatura e pressione rendendo comunque valido, ai fini di questa analisi, il confronto tra le due prove.

Il confronto tra motore ottico e caso in bomba equivalente è stato effettuato utilizzando la prova Spray A presentata nel capitolo precedente: l'utilizzo di condizioni termodinamiche al SOI non coincidenti con le effettive condizioni del motore, in termini di pressione, temperatura e composizione (il caso motore è diluito con azoto), anche in questo caso non inficia la bontà dell'analisi svolta, che ha come unico obiettivo il confronto di massima tra la struttura di fiamma ottenuta nel caso motore e nel caso in bomba.

Un ulteriore limite di questa analisi può essere trovato nella mancata rappresentazione del campo di moto organizzato presente nel motore: le tazze e i condotti di aspirazione dei moderni motori Diesel sono appositamente sagomati per indurre un moto di swirl. Ma anche in questo caso si può affermare che l'analisi rimane, alla luce dell'obiettivo prefissato, solida poichè l'effetto di mixing prodotto dal moto all'interno del cilindro è comunque marginale rispetto a quello indotto dal campo di moto prodotto dall'iniezione diretta ad elevata velocità di combustibile, che da solo delinea le principali caratteristiche del campo di moto e di quello turbolento nella regione dello spray.

Delineato quindi l'obiettivo di questa analisi ed esposti i limiti che essa ha, si riportano in figura 6.15, 6.16, 6.17 e 6.18 i campi di temperatura e frazione massica di OH calcolati per i casi motore e i casi in bomba equivalenti al medesimo istante dopo l'inizio dell'iniezione.

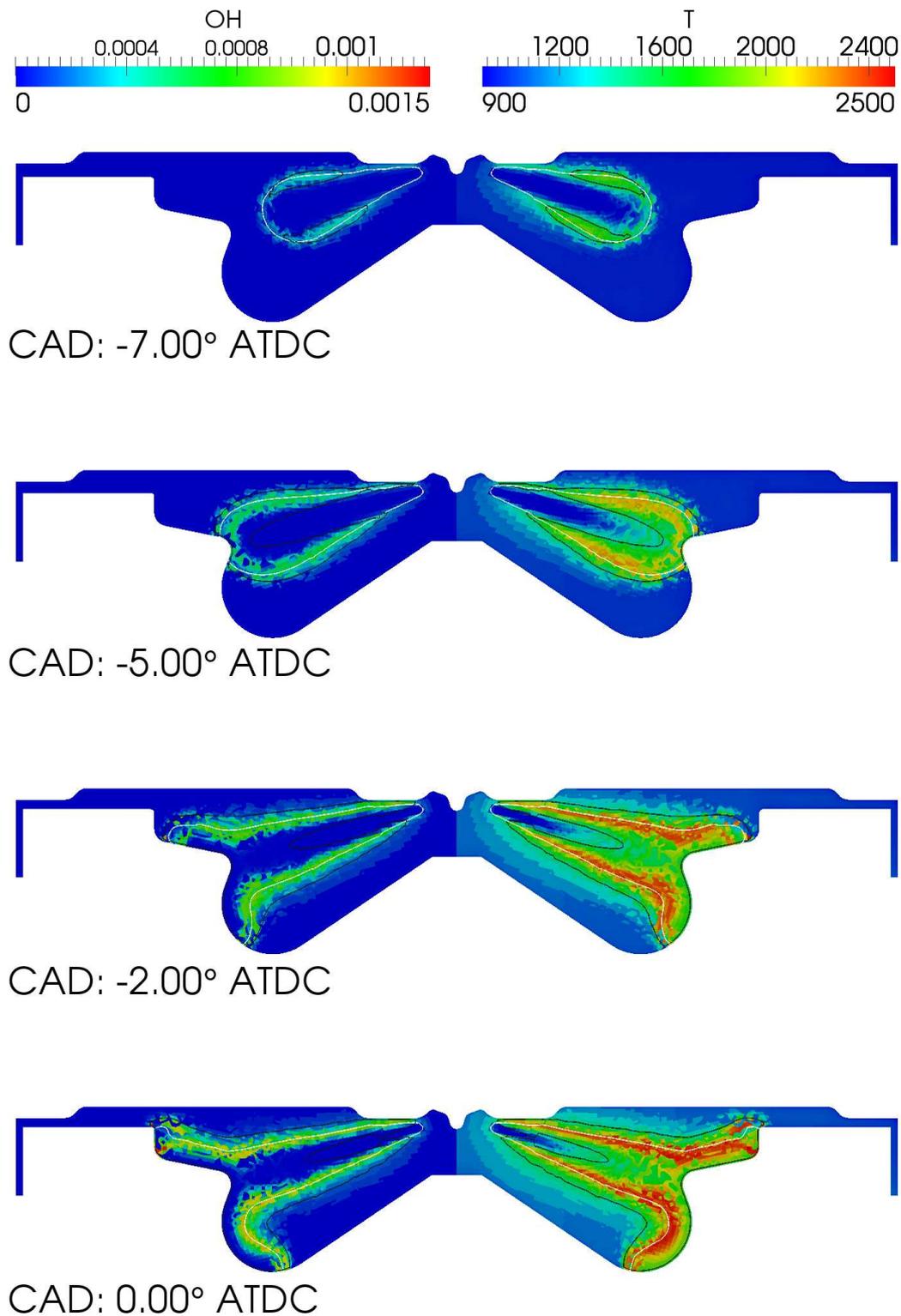


Figura 6.15: Campo di temperatura e frazione massica di OH calcolati nel motore heavy duty utilizzando il meccanismo cinetico Faravelli con criterio di inizializzazione NoClone 45 flamelet. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

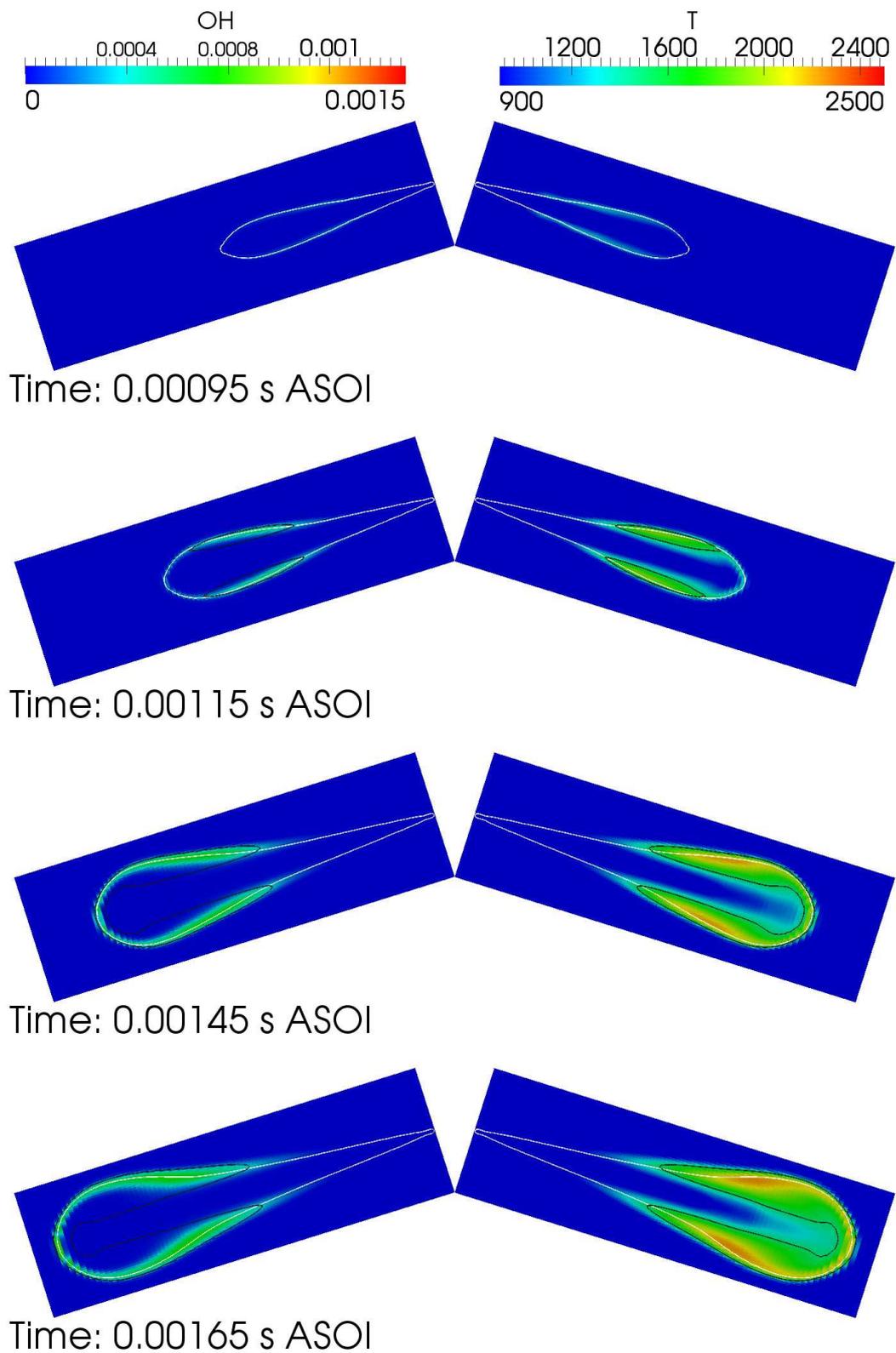


Figura 6.16: Campo di temperatura e frazione massica di OH calcolati nel caso in bomba equivalente del motore heavy duty utilizzando il meccanismo cinetico Faravelli con criterio di inizializzazione NoClone 45 flamelet. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolina nera unisce i punti a 1500 K.

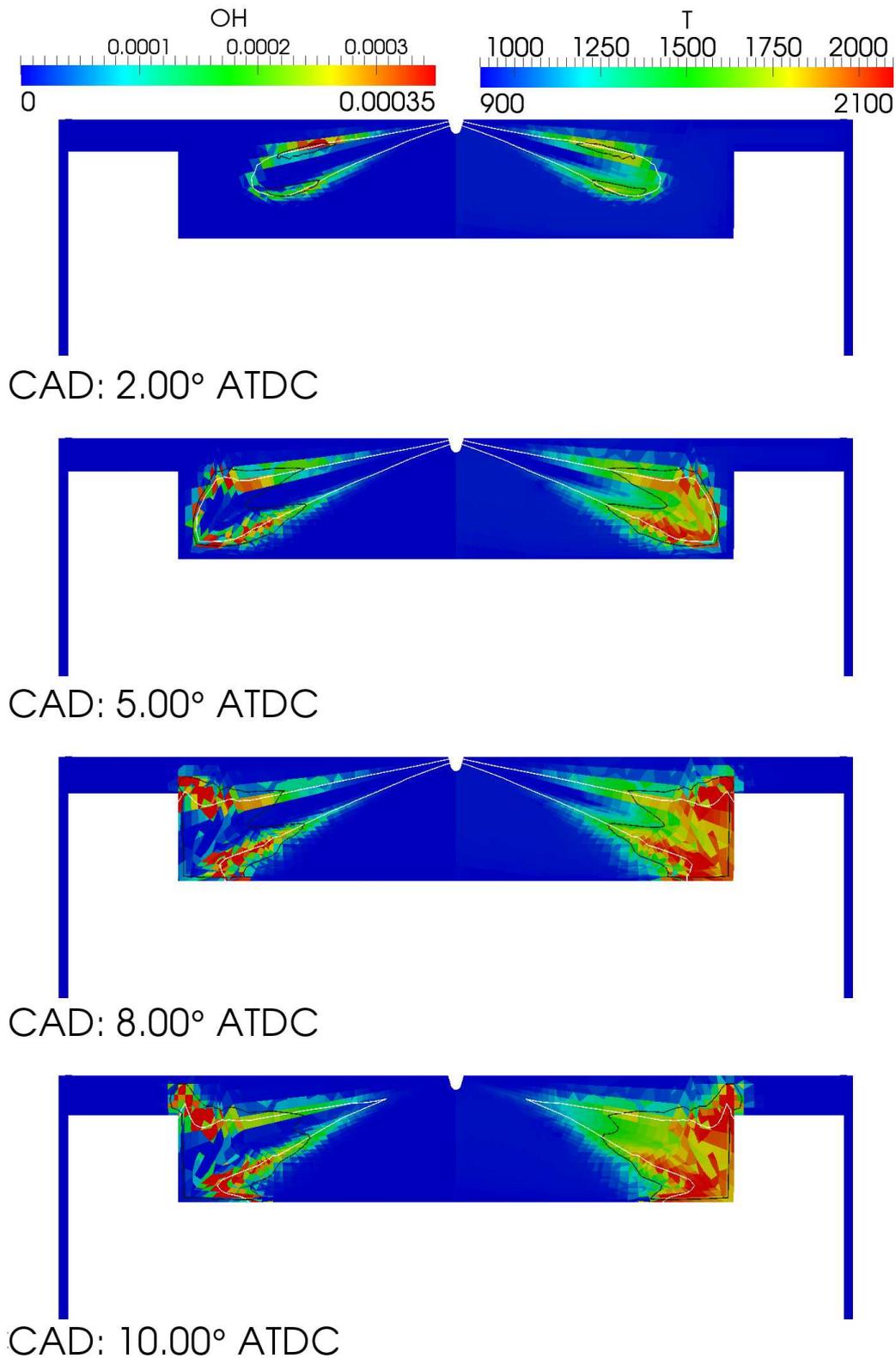


Figura 6.17: Campo di temperatura e frazione massica di OH calcolati nel motore ottico utilizzando il meccanismo cinetico Faravelli con criterio di inizializzazione NoClone 45 flamelet. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

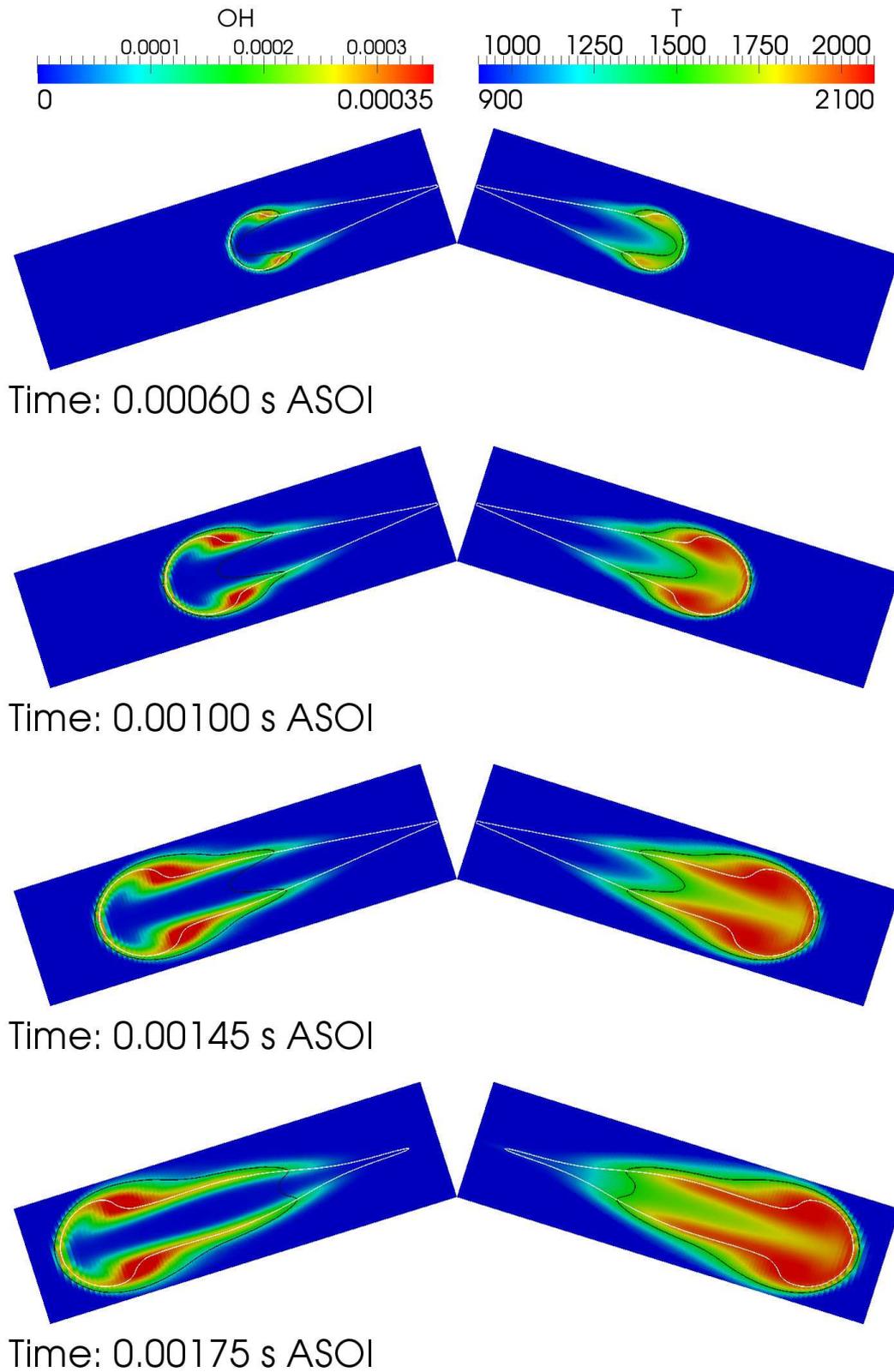


Figura 6.18: Campo di temperatura e frazione massica di OH calcolati nel caso in bomba equivalente del motore ottico utilizzando il meccanismo cinetico Faravelli con criterio di inizializzazione NoClone 45 flamelet. La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

Dal doppio confronto appena presentato si possono trarre interessanti conclusioni:

- il confronto tra le strutture di fiamma del caso motore heavy duty e dell'equivalente caso in bomba presenta sostanziali differenze in termini di stabilizzazione
- il confronto tra le strutture di fiamma del caso motore ottico e dell'equivalente caso in bomba presenta una sostanziale congruenza tra le lunghezze di lift-off

Il diverso comportamento dei confronti presentati è da cercarsi, come accennato in precedenza, nella differenti logiche di generazione della mesh: la mesh del caso motore ottico presenta un importante infittimento nella regione in cui si sviluppa lo spray e il fenomeno di stabilizzazione, garantendo un preciso accoppiamento lagrangiano-euleriano, cosa che invece non accade nel caso motore heavy duty, che presenta una mesh uniformemente distribuita in tutto il dominio.

Come presentato in [29], l'utilizzo di una mesh lasca in prossimità dell'ugello dell'iniettore non permette di cogliere con precisione l'interazione e il trasferimento di quantità di moto, massa ed energia tra lo spray di combustibile e la miscela ossidante in camera, comportando un'erronea valutazione del campo di velocità e della turbolenza, e ancor peggio di \tilde{Z} e \tilde{Z}''^2 , e di conseguenza di $\tilde{\chi}$, portando quindi ad avere una fiamma attaccata all'iniettore nel caso motore heavy quando il modello in bomba, con mesh raffinata nella regione dello spray, presenta una distinta zona di lift-off.

Il confronto tra caso motore ottico e caso in bomba equivalente presenta una precisa corrispondenza della struttura di fiamma e della lunghezza di lift-off, confermando quindi la necessità di una mesh adeguatamente raffinata nella regione dello spray ma soprattutto la bontà delle ipotesi e delle considerazioni prima presentate riguardanti il confronto tra caso motore e caso in bomba.

L'importanza e la centralità dello studio della combustione Diesel in reattori a volume costante, siano esse prove sperimentali o simulazioni numeriche, escono inoltre rafforzate da questa analisi, che ne certifica la rilevanza sia come banco di prova per i modelli di combustione che come ottimo surrogato del processo di combustione nei motori Diesel.

Conclusioni

In questo lavoro si è analizzato il processo di combustione in fiamme turbolente non-premiscelate, tipiche dei motori Diesel, utilizzando un approccio a flamelet instazionari, il modello Representative Interactive Flamelet. Confrontando i risultati delle simulazioni, ottenute con il solver `RIFdieselFoam`, e le rilevazioni sperimentali, fornite dall'ECN, si è investigato il comportamento del modello in funzione del

- meccanismo cinetico
- numero di flamelet
- criterio di suddivisione dei flamelet
- criterio di inizializzazione dei flamelet
- modello di interazione tra flamelet

giungendo alla conclusione che:

- il modello di combustione RIF singolo flamelet non è in grado di cogliere i principali aspetti della struttura di fiamma. La fiamma ottenuta con questo modello è sempre attaccata al nozzle dell'iniettore, presentando regioni di combustione ad alta temperatura intorno a tutta la linea stechiometrica, che si estende appunto fino all'iniettore: utilizzando un solo flamelet, infatti, il modello non può tener conto dei diversi livelli di avanzamento delle reazioni chimiche del combustibile in camera, legato in prima analisi al tempo di residenza e all'interazione con la turbolenza. Nonostante questo, si può affermare che il modello singolo flamelet rimane comunque un validissimo strumento qual'ora si vogliano eseguire analisi di sensitività.
- il modello di combustione, sia singolo flamelet che con flamelet multipli, presenta una forte sensibilità al meccanismo cinetico utilizzato. Questo lascia intendere che lo sviluppo di meccanismi cinetici sempre più accurati comporterà risultati ancora più precisi in termini di ignition delay, picco di rilascio del calore in fase premiscelata e recessione del fronte di fiamma al termine dell'iniezione.
- il modello RIF con flamelet multipli, sia con criterio di inizializzazione Clone sia con quello NoClone, ha presentato notevoli risultati in termini di previsione della

lunghezza di lift-off e della struttura di fiamma diffusiva. La soluzione ottenuta è però funzione del numero di flamelet con andamento asintotico raggiunto utilizzando indicativamente 15 flamelet per ogni 0.5 ms di iniezione

- il criterio di suddivisione basato sulla varianza dello scalar dissipation rate sviluppato in questo lavoro non ha presentato evidenti benefici rispetto al criterio di inizializzazione basato sulla massa di combustibile iniettato con distribuzione uniforme, e lo stesso vale per distribuzioni non lineari applicate al criterio basato sulla massa di combustibile iniettato. Ciò lascia intendere che le soluzioni con elevato numero di flamelet non siano più funzione del criterio di suddivisione.
- le soluzioni con criterio di inizializzazione Clone presentano la formazione di formaldeide, marker delle reazioni a bassa temperatura, anche a ridosso del nozzle dell'iniettore. Questo è legato al grado di avanzamento non nullo del nuovo dominio chimico al momento della sua generazione, cosa che non avviene invece nel caso di inizializzazione indipendente dei domini flamelet, il criterio di inizializzazione NoClone, che garantisce risultati coerenti con le rilevazioni sperimentali sia in termini di struttura di fiamma diffusiva, che di lift-off che di first-stage ignition
- l'utilizzo del modello di interazione Attack, soprattutto nel caso di criterio di inizializzazione NoClone, è sì efficace in termini di previsione del rilascio del calore durante la first-stage ignition e la fase premiscelata, ma allo stesso tempo peggiora le capacità predittive in termini di struttura di fiamma diffusiva e stabilizzazione. Lasciando da parte per un momento i risultati numerici, è evidente che il combustibile iniettato in fasi successive interagisca con quello già in camera (la prova con iniezione multipla ne è forse l'emblema per eccellenza), palesando quindi l'importanza della formulazione di un nuovo e più accurato modello di interazione, possibile spunto per futuri sviluppi

Le prove svolte sui casi motore e i casi in bomba equivalenti hanno restituito due interessanti considerazioni:

- la mesh deve essere adeguatamente raffinata nella regione dello spray per una corretta valutazione dell'interazione lagrangiano-euleriano, indispensabile per una precisa risoluzione di \tilde{Z} e \tilde{Z}''^2
- le prove svolte in bomba equivalente consegnano ottime indicazioni della struttura di fiamma dei casi motore, incentivando ulteriormente i futuri lavori su prove in reattori a volume costante

Infine, il lavoro svolto per ridurre i tempi di calcolo, con lo sviluppo e l'implementazione dell'approccio *Virtual Species*, il frozing e il merging dei flamelet, ha permesso di abbattere sensibilmente le ore di calcolo con variazioni non rilevanti sulle soluzioni ottenute. Lavori futuri potranno continuare su questa linea, sviluppando nuovi approcci che riducano ulteriormente l'onere computazionale.

Appendice A

Analisi di sensitività del modello RIF

Sono ora presentati i risultati delle simulazione effettuate utilizzando le condizioni Spray H, presentate nel Capitolo 4, con quattro modelli RIF artificialmente modificati per poter meglio cogliere l'importanza e gli effetti delle diverse grandezze di interesse sulla struttura di fiamma e sui parametri globali.

A.1 Imposizione di un unico valore di ChiStMean

La prima analisi di sensitività punta ad investigare l'influenza dell'andamento dello scalar dissipation rate medio stechiometrico sul comportamento del modello.

L'importanza dell'evoluzione di $\widehat{\chi}_{st}$ sulla soluzione del dominio chimico è stata analizzata in precedenza, senza però investigare gli effetti che essa ha sulla soluzione del dominio fisico.

Si è quindi deciso di implementare all'interno della *Lib-ICE* un modello mRIF che utilizzi come valore istantaneo di $\widehat{\chi}_{st,l}$ per ogni flamelet un unico valore di ChiStMean calcolato alla stregua di un caso con singolo flamelet: l'idea che lo scalar dissipation rate medio stechiometrico sia unico per tutta la fiamma lascia intendere che i flamelet, rappresentanti il combustibile iniettato, abbiano sì una storia evolutiva a sè stante ma con livelli di interazione tra chimica e turbolenza identici per tutta la fiamma.

Il modello mRIF con criterio di inizializzazione Clone con un unico valore di ChiStMean equivale al modello RIF singolo flamelet, in quanto si ha continuità sia sull'evoluzione temporale dei domini chimici che dello scalar dissipation rate medio stechiometrico.

In figura A.1 sono riportati gli andamenti del ChiStMean per i casi con imposizione di un unico valore di scalar dissipation rate medio stechiometrico (da ora in poi si utilizzerà la dicitura OneChiStMean per indicare i casi con questa particolare caratteristica), singolo flamelet e NoClone 15 flamelet: è interessante notare come l'evoluzione del $\widehat{\chi}_{st}$ per i casi singolo flamelet e OneChiStMean coincido, il che vuol dire che i campi delle grandezze turbolente (\widetilde{k} , $\widetilde{\varepsilon}$ e \widetilde{Z}''^2 e in definitiva $\widetilde{\chi}$) non vengono distorti dalle variazioni che le differenti evoluzioni del ChiStMean hanno sulla struttura di fiamma. L'evoluzione temporale

dei ChiStMean nel caso di flamelet multipli è abbastanza regolare, con l'unica eccezione del primo flamelet che ha un'interazione con l'aria in quiete nel reattore completamente differente rispetto ai successivi, con un intenso picco iniziale seguito da una rapida diminuzione e stabilizzazione: per comprendere gli effetti che questi hanno sulla struttura di fiamma e sulla legge di rilascio del calore può essere utile analizzare i campi di temperatura e frazione massica di OH insieme alla curva di pressione confrontandole con le soluzioni ottenute utilizzando i criteri di inizializzazione Clone e NoClone e singolo flamelet.

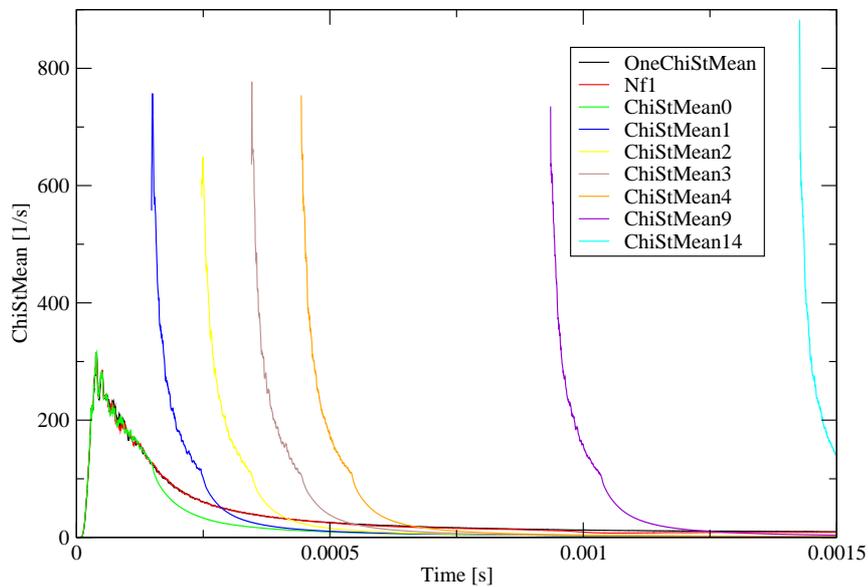


Figura A.1: Confronto tra scalar dissipation rate medio stechiometrico nel caso di unico valore imposto di ChiStMean, singolo flamelet e 15 flamelet con criterio di inizializzazione NoClone.

Partendo quindi dal confronto sulle curve di pressione, presentato in figura A.2, è possibile iniziare a motivare quelle che ad una prima analisi possono sembrare delle inconsistenze.

In primis, il ritardo all'accensione: se in precedenza è stato affermato che elevati livelli di ChiStMean aumentano il ritardo all'accensione, perchè la soluzione con OneChiStMean, che non presenta il picco di scalar dissipation rate medio stechiometrico rilevabile al momento della sua attivazione, presenta un ignition delay superiore a quello stimabile sia con il singolo flamelet, che per inciso si ricorda avere identica storia evolutiva di ChiStMean, che con flamelet multipli Clone e NoClone? La risposta, seppur non banale, può essere ricercata e assemblata a partire dalle analisi fondamentali espone nel Capitolo 4, e, in estrema sintesi, può suonare come:

- è sì vero che l'evoluzione di ChiStMean nei casi OneChiStMean e singolo flamelet

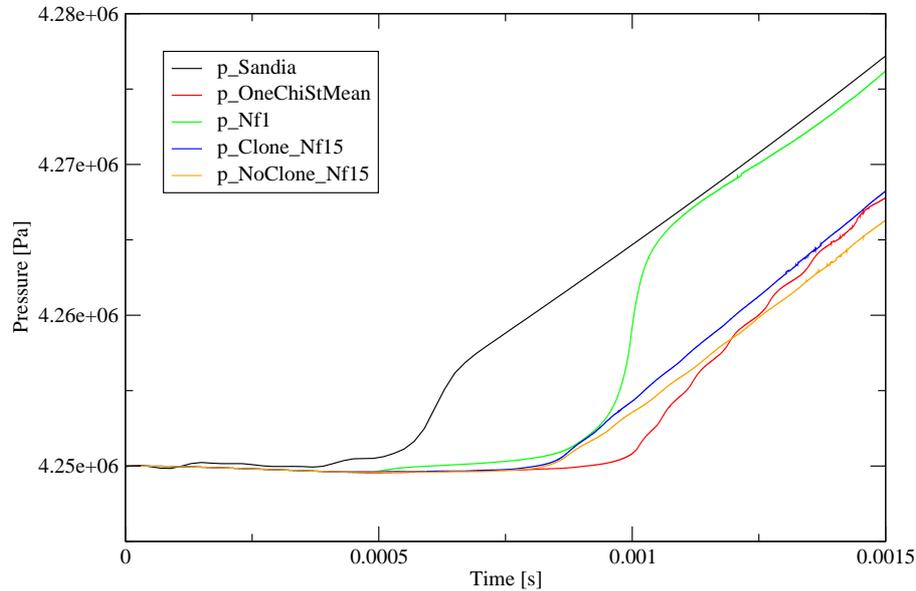


Figura A.2: Confronto tra curva di pressione sperimentale, curva di pressione calcolata imponendo un unico valore di ChiStMean (15 flamelet), singolo flamelet, Clone (15 flamelet) e NoClone (15 flamelet).

è il medesimo, ma la storia evolutiva dei flamelet nel caso OneChiStMean presenta una serie di discontinuità, legate all'inizializzazione con soluzione di pure mixing, che abbassano il livello medio di avanzamento dei domini chimici, con il conseguente incremento del ritardo all'accensione

- è altresì vero che l'evoluzione dello scalar dissipation rate medio stechiometrico nel caso di OneChiStMean non presenta mai livelli estremamente elevati, poichè calcolato su tutta la massa di combustibile già iniettata, ma è altrettanto vero che il transitorio iniziale riscontrabile nell'evoluzione dei $\widehat{\chi_{st,l}}$ per la simulazione NoClone si consuma rapidamente e porta, in seguito all'attivazione del flamelet successivo, a livelli di ChiStMean inferiori rispetto al valor medio degli scalar dissipation rate medio stechiometrico, che rimane sì sempre limitato in valore assoluto ma si assesta nella zona a cavallo del ChiStMean di extinction, che per il meccanismo di Lu-Law vale 42 1/s, con effetti di diffusione turbolenta che rallentano quindi l'instaurarsi del fenomeno di runaway e quindi delle reazioni di alta temperatura

Ancora più interessante è interrogarsi sul perchè le reazioni di bassa temperatura e il picco di rilascio del calore premiscelato rilevabili nel caso singolo flamelet lascino lo spazio ad evidenti oscillazioni sulla curva di pressione, praticamente assenti in quelle Clone e NoClone con 15 flamelet ma rilevabili in quelle con 5 flamelet. La spiegazione è da cercarsi

ancora una volta nel delicato equilibrio tra evoluzione delle reazioni chimiche nel dominio flamelet e andamento del ChiStMean: le oscillazioni sono infatti il frutto delle accensioni in sequenza dei flamelet, precedute però da lunghe fasi di reazioni a basse temperature, ridotte nel caso Clone e NoClone dove la rapida decrescita dei $\widehat{\chi}_{st,l}$ porta ad una rapida transizione verso le reazioni di alta temperatura, smorzando così le fluttuazioni sulla legge di rilascio del calore e quindi sulla curva di pressione.

Le osservazioni ora fatte trovano conferma anche nella struttura di fiamma, rilevabile nel campo di temperatura e di frazione massica di OH , che viene ora presentata in figura A.3 e A.4 insieme alle soluzioni dei casi Clone e NoClone.

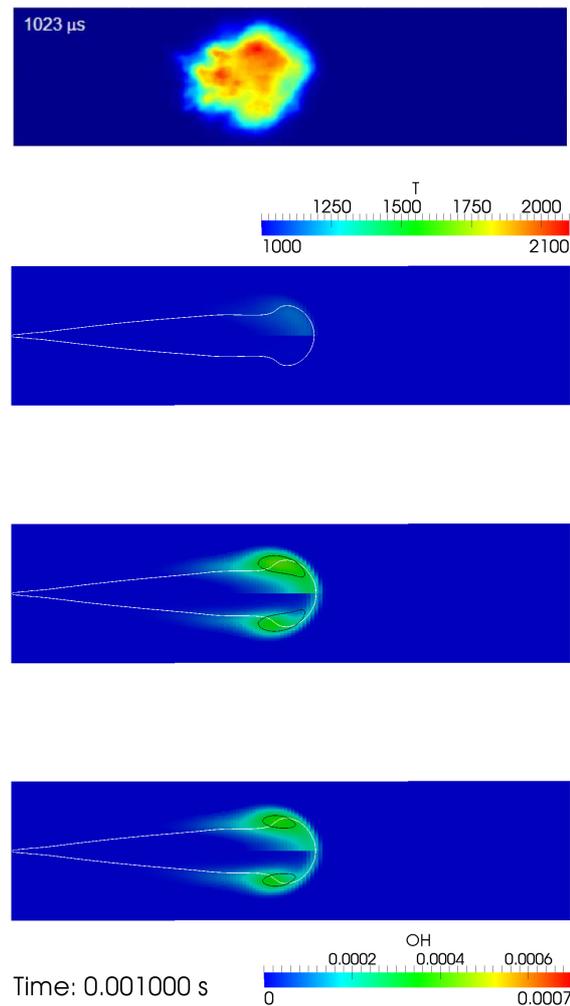


Figura A.3: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura e frazione massica di OH a 1 ms calcolati utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone con 15 flamelet ed un unico valore di ChiStMean (seconda immagine), con il criterio di inizializzazione Clone 15 flamelet (terza immagine) e NoClone 15 flamelet (quarta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

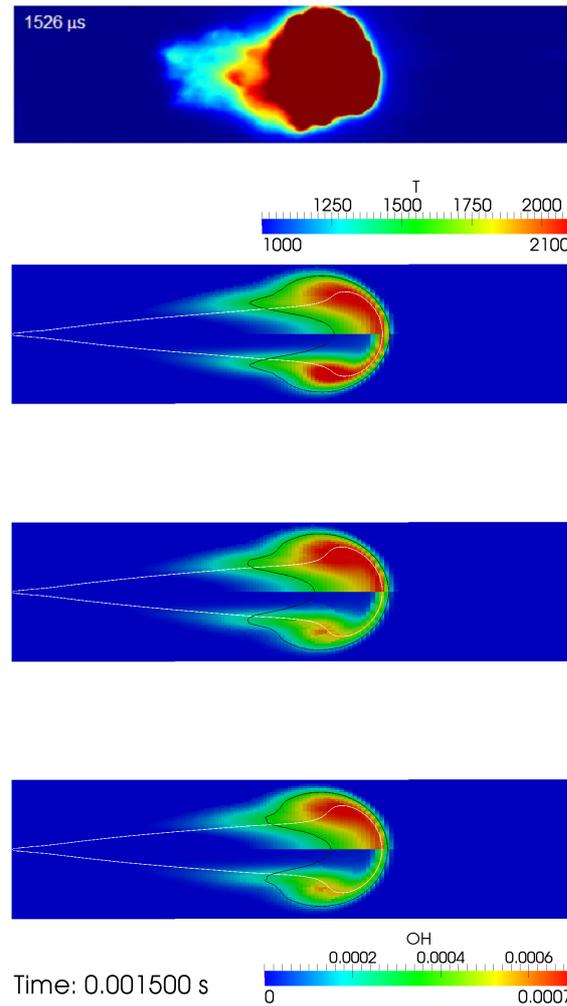


Figura A.4: Chemiluminescenza (prima immagine), campo di temperatura e frazione massica di OH a 1.5 ms calcolati utilizzando il criterio di inizializzazione NoClone con 15 flamelet ed un unico valore di ChiStMean (seconda immagine), con il criterio di inizializzazione Clone 15 flamelet (terza immagine) e NoClone 15 flamelet (quarta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

L'aumento del ritardo all'accensione è rilevabile nel livello di temperatura e frazione di OH considerevolmente inferiore rispetto ai casi Clone e NoClone, ma in ogni modo localizzato in testa allo spray. Al diminuire del ChiStMean, l'avanzamento delle reazioni cresce rapidamente e lo sviluppo avviene contemporaneamente per tutti i flamelet, comportando così uno sviluppo globale della struttura di fiamma superiore a quello rilevabile nei casi Clone e NoClone, ma ancora una volta localizzato correttamente in testa allo spray e nella zona stechiometrica mantenendo la tipica conformazione bilobata.

Si può quindi concludere che l'imposizione di un unico valore di ChiStMean non permette di ottenere una migliore predizione della struttura di fiamma, ma in ogni modo è utile nell'ottica di una più profonda comprensione della complessa interazione tra domini chimici, dominio fisico ed evoluzione dello scalar dissipation rate.

A.2 Imposizione di variazioni della turbulence-chemistry interaction

La seconda analisi di sensitività punta ad investigare l'influenza della β -PDF e della diffusione nel dominio flamelet sul comportamento del modello. Il modello RIF integra la turbulence-chemistry interaction inserendo all'interno delle equazioni del dominio flamelet il termine diffusivo funzione delle grandezze turbolente \tilde{k} , $\tilde{\varepsilon}$ e $\widetilde{Z''^2}$ calcolate nel dominio fisico e tramite la β -PDF che risolve la distribuzione delle fluttuazioni per le scale inferiori rispetto a quella della mesh. Sono quindi state sviluppate tre varianti del modello RIF: una in cui è imposta una distribuzione del tipo δ -PDF, una seconda in cui è assente la varianza di Z , imponendo contemporaneamente nullo lo scalar dissipation rate e una distribuzione del tipo δ -PDF, ed una terza in cui è nullo C_χ , e di conseguenza $\widehat{\chi_{st}}$.

Imponendo nulla la varianza della mixture fraction si suppone che le celle del dominio fisico abbiano composizione uniforme, alla stregua di quanto viene fatto nel modello di combustione well-mixed: così facendo le fluttuazioni di temperatura e di frazioni massiche vengono trascurate.

Il motivo per cui la distribuzione della β -PDF con zero varianza o comunque imposta annullando la varianza solo per al momento dell'integrazione della β -PDF, operativamente parlando, non è in realtà una δ -PDF è legato unicamente a motivi numerici: l'integrazione di una β -PDF con parametri elevati implica gravi problemi di robustezza e accuratezza, come esposto in [37], rendendo così necessaria l'imposizione di alcune limitazioni nei valori di α e β , portando quindi ad un profilo normale con range limitato ma non infinitesimo.

Per comprendere a fondo gli effetti si confronteranno, in figura A.5 e A.6, i campi di temperatura e frazione massica di OH ottenuti con il modello mRIF 45 flamelet NoClone, RIF singolo flamelet, RIF singolo flamelet con δ -PDF, RIF con varianza nulla della mixture fraction, RIF con ChiStMean nullo e con il modello well-mixed, mentre in figura A.7 e A.8 sono riportate le soluzioni del profilo di temperatura calcolati con e senza scalar dissipation rate. La soluzione del modello well-mixed è stata calcolata utilizzando il solver `CCMdieselFoamAutoRefine`, implementato all'interno della *Lib-ICE*, che accoppia al modello di combustione well-mixed l'approccio multi-zone Chemistry Coordinate Mapping (CCM): per ulteriori informazioni si rimanda a [38].

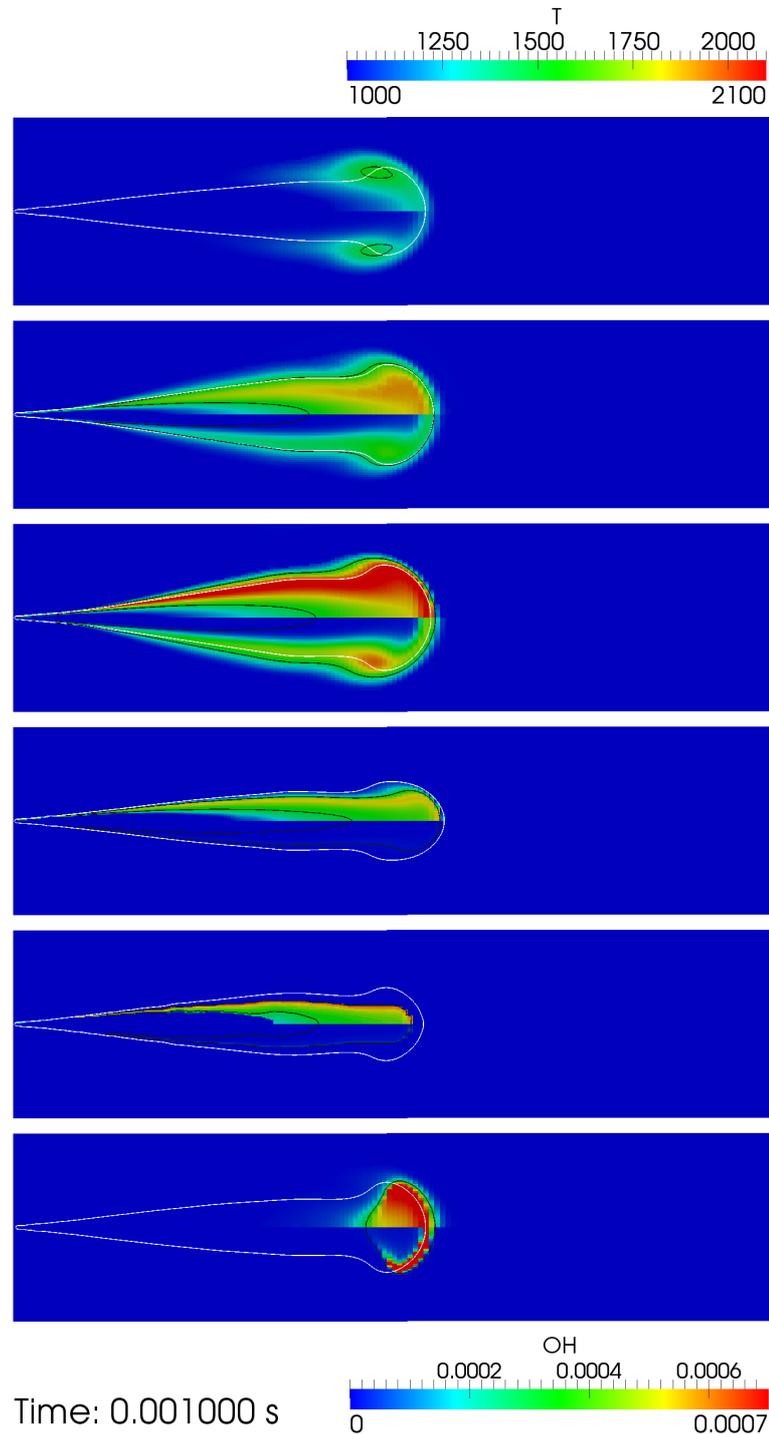


Figura A.5: Campo di temperatura e frazione massica di OH a 1 ms calcolati utilizzando il modello mRIF NoClone 45 flamelet (prima immagine), RIF singolo flamelet (seconda immagine), RIF singolo flamelet con δ -PDF (terza immagine), RIF singolo flamelet con varianza della mixture fraction nulla (quarta immagine), RIF singolo flamelet con ChiStMean nullo (quinta immagine) e con il modello di combustione well-mixed (sesta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolinea nera unisce i punti a 1500 K.

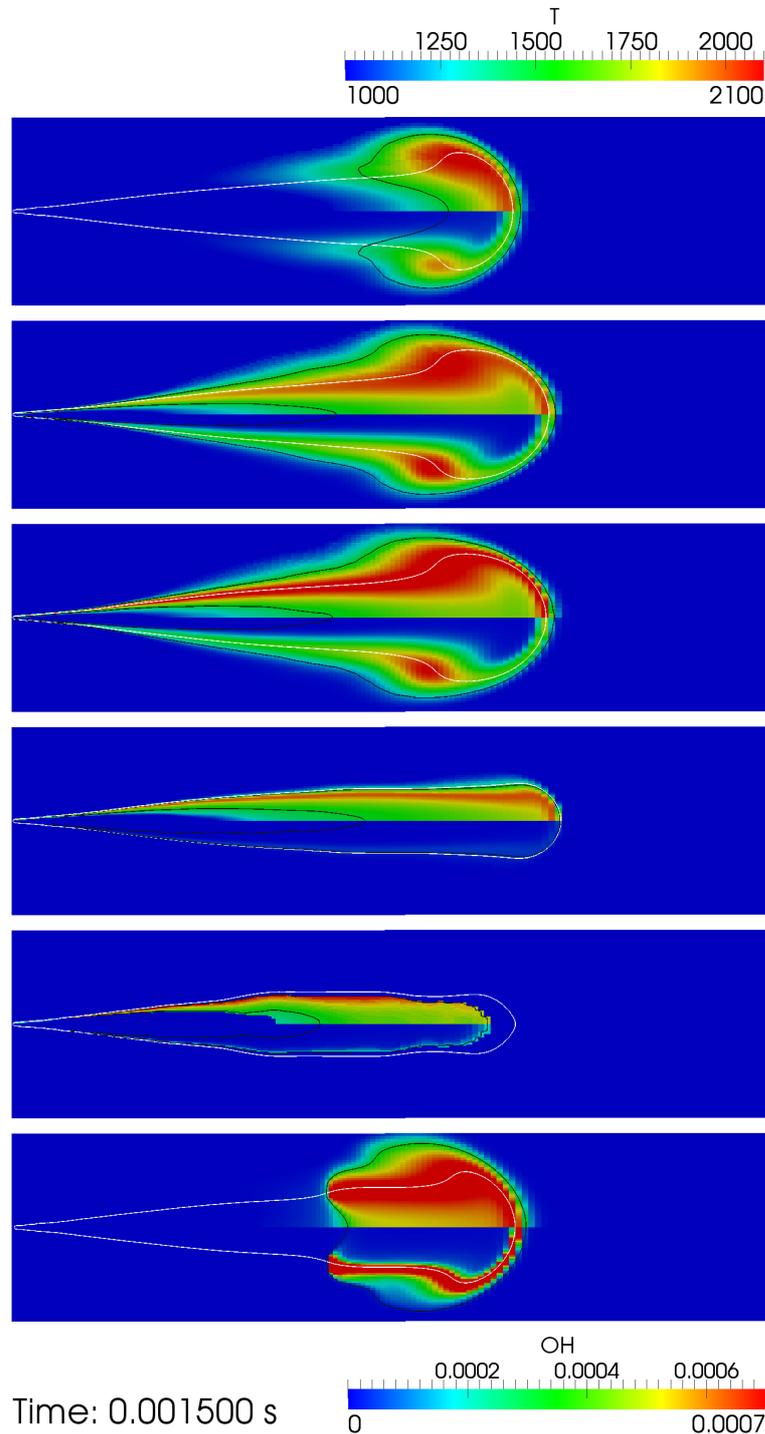


Figura A.6: Campo di temperatura e frazione massica di OH a 1.5 ms calcolati utilizzando il modello mRIF NoClone 45 flamelet (prima immagine), RIF singolo flamelet (seconda immagine), RIF singolo flamelet con δ -PDF (terza immagine), RIF singolo flamelet con varianza della mixture fraction nulla (quarta immagine), RIF singolo flamelet con ChiStMean nullo (quinta immagine) e con il modello di combustione well-mixed (sesta immagine). La linea bianca è il luogo dei punti con miscela stechiometrica, mentre l'isolina nera unisce i punti a 1500 K.

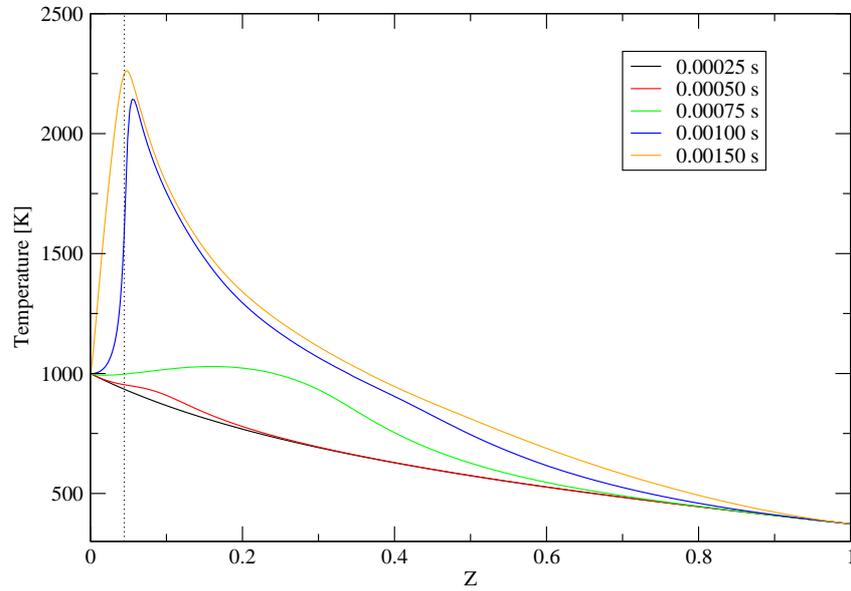


Figura A.7: Distribuzione dei temperatura nel dominio Z con scalar dissipation rate. La linea tratteggiata indica il valore di $Z = Z_{st}$.

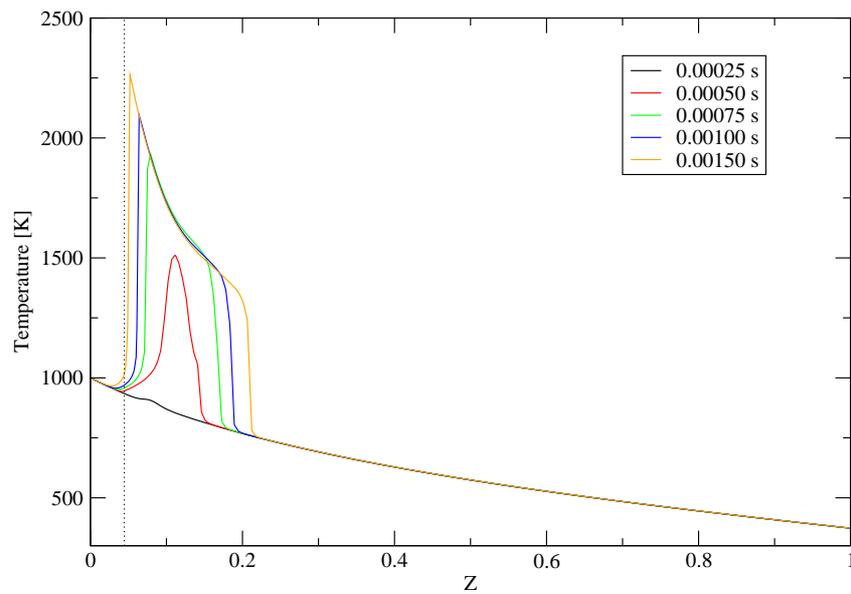


Figura A.8: Distribuzione dei temperatura nel dominio Z senza scalar dissipation rate. La linea tratteggiata indica il valore di $Z = Z_{st}$.

Dal confronto proposto si può concludere che:

- il fenomeno di stabilizzazione nel modello RIF è influenzato prevalentemente dal processo di combustione in regime diffusivo, regolato e controllato dall'evoluzione dello scalar dissipation rate, mentre il fenomeno di stabilizzazione nel modello well-mixed è influenzato dal campo di moto in camera e dalla diffusività turbolenta e si instaura per pura accensione e triple flame: l'utilizzo di un modello RIF senza scalar dissipation rate annulla l'effetto stabilizzante, solitamente riscontrabile nella brusca curvatura della linea stechiometrica
- lo scalar dissipation rate non solo influisce sul fenomeno di stabilizzazione della fiamma, ma regolando il termine diffusivo nelle equazioni del dominio flamelet influisce sull'evoluzione dell'avanzamento dei domini chimici portando quindi a soluzioni molto meno diffuse, sia nel dominio flamelet che in quello fisico
- nei casi senza scalar dissipation rate il picco di temperatura è spostato nella regione ricca della fiamma, a causa della lenta accensione della regione magra del dominio Z che nel caso con scalar dissipation rate accende grazie alla diffusione normale di prodotti intermedi ed energia
- l'effetto della β -PDF è rilevabile soprattutto nelle prime fasi del processo, poichè le fluttuazioni della mixture fraction vengono progressivamente consumate dallo scalar dissipation rate

Bibliografia

- [1] Pacala, S., et al., Solving the climate problem for the next 50 Years with current technologies, *Science*.
- [2] Bruneaux, G., Combustion structure of free and wall-impinging Diesel jets by simultaneous laser-induced fluorescence of formaldehyde, poly-aromatic hydrocarbons, and hydroxides, *International Journal of Engine Research*.
- [3] Skeen, S. A., Manin, J., Pickett, L. M., Simultaneous formaldehyde PLIF and high-speed schlieren imaging for ignition visualization in high-pressure spray flames, *Proceedings of the Combustion Institute*.
- [4] Stiesch, G., Modeling engine spray and combustion processes, *Springer*.
- [5] Ferrari, G., Motori a combustione interna, *il capitulo*.
- [6] Versteeg, H. K., Malalasekera, W., An introduction to computational fluid dynamics, *PEARSON*.
- [7] Turns, S. R., An introduction to combustion, *McGraw-Hill*.
- [8] Barths, H., Hasse, C., Peters, N., Computational fluid dynamics modelling of non-premixed combustion in direct injection Diesel engines, *International Journal of Engines Research*.
- [9] Echekki, T., Turbulent combustion modeling, *Springer*.
- [10] Lakshminarayanan, P. A., Modelling Diesel combustion, *Springer*.
- [11] D'Errico, G., Lucchini, T., Atzler, F., Rotondi, R., Computational fluid dynamics simulation of Diesel engines with sophisticated injection strategies for in-cylinder pollutant controls, *Energy Fuels*.
- [12] Kong, S. C., Kim, H., Reitz, R. D., Kim, Y., Comparisons of Diesel PCCI combustion simulations using a representative interactive flamelet model and direct integration of CFD with detailed chemistry, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*.

-
- [13] Singh, S., Reitz, R., Musculus, M., Comparison of the Characteristic Time (CTC), Representative Interactive Flamelet (RIF), and direct integration with detailed chemistry combustion models against optical diagnostic data for multi-mode combustion in a heavy-duty DI Diesel engine *SAE Technical Paper*.
- [14] Dec, J. E., A conceptual model of di Diesel combustion based on laser-sheet imaging, *SAE Technical Paper*.
- [15] Musculus, M. P. B., Miles, P. C., Pickett, L. M., Conceptual models for partially premixed low-temperature Diesel combustion, *Progress in Energy and Combustion Science*.
- [16] Peters, N., Turbulent combustion, *CAMBRIDGE*.
- [17] Peters, N., Laminar flamelet concepts in turbulent combustion, *Twenty-first Symposium (International) on Combustion*.
- [18] Poinso, T., Theoretical and numerical combustion, *Edwards*.
- [19] Claramunt, K., Cònsul, R., Carbonell, D., Pérez-Segarra, C.D., Analysis of the laminar flamelet concept for nonpremixed laminar flames, *Combustion and Flame*.
- [20] Barths, H., Hasse, C., Bikas, G., Peters, N., Simulation of combustion in direct injection Diesel engines using a Eulerian Particle Flamelet model, *Proceedings of the Combustion Institute*.
- [21] Barths, H., Peters, N., Brehm, N., Mack, A., Pfitzner, M., Smiljanovski, V., Simulation of pollutant formation in a gas-turbine combustor using unsteady flamelets, *Symposium (International) on Combustion*.
- [22] Mayer, D., A multiple Flamelet Interaction model applied to multiple injection Diesel combustion, *Diploma Thesis*.
- [23] Vogel, S., Coupling of a level-set model for premixed combustion with a diffusion flamelet model, *Ph.D Thesis*.
- [24] Lehtiniemi, H., Zhang, Y., Rawat, R., Mauss, F., Efficient 3-D CFD combustion modeling with transient flamelet models, *SAE Technical Paper*.
- [25] Colombi, P., Development and validation of a CFD model for combustion simulations in direct injection Diesel engines based on detailed chemistry and the unsteady diffusion flamelet assumption, *Tesi di Laurea*.
- [26] OpenFOAM Web Site, <http://www.openfoam.org/>.
- [27] Henderson, A., Ahrens, J., Law, C., The ParaView Guide, *Kitware Inc.*

- [28] Engine Combustion Network Web Site, <http://www.sandia.gov/ecn/>.
- [29] Lucchini, T., D'Errico, G., Ettore, D., Numerical investigation of the spray-mesh-turbulence interaction for high-pressure, evaporating sprays at engine conditions, *International Journal of Heat and Fluid Flow*.
- [30] Nordin, N., Complex chemistry modeling of Diesel spray combustion, *Ph.D Thesis*.
- [31] Contino, F., Jeanmart, H., Lucchini, T., D'Errico, G., Coupling of *in situ* adaptive tabulation and dynamic adaptive chemistry: An effective method for solving combustion in engine simulations, *Proceedings of the Combustion Institute*.
- [32] Contino, F., Masurier, J., Foucher, F., Lucchini, T., D'Errico, G., Dagaut, P., CFD simulations using the TDAC method to model iso-octane combustion for a large range of ozone seeding and temperature conditions in a single cylinder HCCI engine, *Fuel*.
- [33] Curran, H. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., Westbrook, C. K., A comprehensive modeling study of n-heptane oxidation, *Combustion and Flame*.
- [34] Chevalier, C., Louessard, P., Müller, U. C., Warnatz, J., A detailed low-temperature reaction mechanism of n-heptane auto-ignition, *International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Engines COMODIA 90*.
- [35] Lu, T., Law, C. K., Yoo Sang, C., Chen, J. H., Dynamic stiffness removal for direct numerical simulations, *Combustion and Flame*.
- [36] Liu, S., Hewson, J. C., Chen, J. H., Pitsch, H., Effects of strain rate on high-pressure nonpremixed n-heptane autoignition in counterflow, *Combustion and Flame*.
- [37] Liu, F., Guo, H., Smallwood, G. J., Gülder, Ö. L., Matovic, M. D., A robust and accurate algorithm of the β -PDF integration and its application to turbulent methane-air diffusion combustion in a gas turbine combustor simulator, *International Journal of Thermal Sciences*.
- [38] D'Errico, G., Lucchini, T., Contino, F., Jangi, M., Bai, X.-S., Comparison of well-mixed and multiple representative interactive flamelet approaches for Diesel spray combustion modelling, *Combustion Theory and Modelling*.
- [39] CMT-Motores Térmicos Web Site, <http://www.cmt.upv.es/>.
- [40] Lu, T., Law, C. K., A Directed Relation Graph method for mechanism reduction, *Proceedings of the Combustion Institute*.
- [41] Lu, T., Law, C. K., Linear-time reduction of a large mechanism with Directed Relation Graph: n-Heptane and iso-octane, *Combustion and Flame*.

-
- [42] Luo, Z., Som, S., Sarathy, S. M., Plomer, M., Pitz, W. J., Longman, D. E., Lu, T. F., Development and validation of an n-Dodecane skeletal mechanism for Diesel spray-combustion applications, *Combustion and Theory Modeling*.
- [43] Sarathy, S. M., Westbrook, C. K., Mehl, M., Pitz, W. J., Togbe, C., Dagaut, P., Wang, H., Oehlschlaeger, M. A., Niemann, U., Seshadri, K., Veloo, P. S., Ji, C., Egolfopoulos, F. N., Lu, T., Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C7 to C20, *Combustion and Flame*.
- [44] Ranzi, E., Frassoldati, A., Grana, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A. P., Law, C. K., Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels, *Progress in Energy and Combustion Science*.
- [45] Moss, J. B., Stewart, C. D., Young, K. J., Modeling soot formation and burnout in a high temperature laminar diffusion flame burning under oxygen-enriched conditions, *Combustion and Flame*.
- [46] Skeen, S. A., et al., Visualization of ignition processes in high-pressure sprays with multiple injections of n-dodecane, *SAE Technical Paper*.
- [47] Hasse, C., Peters, N., A two mixture fraction flamelet model applied to split injections in a DI Diesel engine, *Proceedings of the Combustion Institute*.
- [48] Felsch, C., Gauding, M., Hasse, C., Vogel, S., Peters, N., An extended flamelet model for multiple injections in DI Diesel engines, *Proceedings of the Combustion Institute*.
- [49] D'Errico, G., et al., Combustion modeling in heavy duty Diesel engines using detailed chemistry and turbulence-chemistry interaction, *SAE Technical Paper*.
- [50] IFP Energie Nouvelles Web Site, <http://www.ifpenergiesnouvelles.com/>.