

# POLITECNICO DI MILANO

Facoltà di Ingegneria Industriale e dell'Informazione  
Dipartimento di Energia

Corso di Laurea Magistrale in Ingegneria Energetica



## MODELLAZIONE CFD DEL PROCESSO DI COMBUSTIONE A BASSA TEMPERATURA ED ELEVATO RENDIMENTO IN MOTORI DIESEL PER IMPIEGO INDUSTRIALE

Relatore: Prof. Gianluca D'Errico

Correlatori: Prof. Tommaso Lucchini

PhD. Amin Maghbouli

Tesi di Laurea di:

Alessandro Tansini Matr. 801140

Anno Accademico 2014-2015



*Quando la tempesta sarà finita, probabilmente non saprai  
neanche tu come hai fatto ad attraversarla e a uscirne vivo.  
Anzi, non sarai nemmeno sicuro se sia finita per davvero.*

*Ma su un punto non c'è dubbio.  
Ed è che tu, uscito da quel vento,  
non sarai lo stesso che vi è entrato.*

**Haruki Murakami**





## *Ringraziamenti*

*È una gran gioia essere finalmente arrivato al traguardo a lungo sognato. Vorrei fare una dedica a tutte le persone che mi hanno supportato, consigliato, insegnato e accompagnato. Il più grande e riconoscente grazie va ai miei genitori, Enrico e Lodovica. Non solo per la fiducia che hanno riposto in me, ma anche e soprattutto per la loro costante presenza e comprensione. Grazie a mia sorella Silvia, che è sempre stata un riferimento durante questi anni. Seguendo il suo esempio non potevo di certo sbagliare. Un grandissimo grazie va al resto della mia grande e meravigliosa famiglia. A coloro che hanno creduto in me e hanno permesso che anche io credessi in me. Ringrazio sinceramente il Professor D'Errico e il Professor Lucchini per avermi coinvolto e seguito in questo interessante progetto. Un grazie va anche a tutti i membri del gruppo motori del Politecnico di Milano, che con il loro prezioso aiuto mi hanno salvato in moltissime occasioni. Un grazie particolare va a Roberto e ad Amin, per la loro disponibilità e per i loro consigli. Ai miei compagni di viaggio, che hanno condiviso con me dolori e gioie di questo lungo percorso: Stefano, Andrea, Daniel, Januarìo, Marco, Lucrezia, Riccardo ed Enrico. È stato un prezioso dono avere trovato degli AMICI e non solo dei semplici compagni di corso. Un grazie al Tara (Andrea), colui che "si deve badare di me", io "mi devo badare di lui", sperando che tutto vada avanti così. Grazie agli smisi boys e ai tava boys per le risate e per ogni momento condiviso. In particolare a Parro (Edoardo), che mi ha accompagnato in numerosi sabati e domeniche di studio in quel di Villa Braila. A tal proposito è doveroso ringraziare anche Matteo, Giorgio e Giulia. Grazie ai ragazzi dell'auletta tesisti, il cui aiuto e la cui compagnia sono stati fondamentali. Vi auguro il meglio e spero che ci si possa ritrovare in futuro. Grazie ai miei ex coinquilini: Angelo, Luca e Lorenza. È stato un piacere vivere sotto lo stesso tetto e porterò per sempre un bel ricordo di quei momenti. Grazie a tutti i miei amici motociclisti, compagni di "smotorate" che mi hanno fatto divertire e scaricare un po di tensione.*

*Grazie davvero, grazie di cuore, a tutti quelli che mi hanno accompagnato lungo la strada che mi ha permesso di arrivare dove sono ora.*



# Riassunto esteso

## Presentazione del lavoro

In questo lavoro si è analizzato il funzionamento della combustione PCCI (*Premixed Charge Compression Ignition*), applicata ad un motore industriale di grande taglia. Lo studio è stato svolto in collaborazione con *Fiat Powertrain Technologies*, che ha fornito le geometrie dei motori ed indicato le condizioni operative da studiare.

È stato necessario effettuare una fase iniziale di studio individuale, riguardo la simulazione numerica della combustione e le combustioni innovative a bassa temperatura. Ci si è quindi focalizzati sullo studio delle combustioni PCCI per capirne vantaggi e svantaggi. Si sono prese in considerazione anche le logiche progettuali dei motori che adoperano tale tipo di combustione, e le problematiche di funzionamento. In seguito alla fase di studio individuale, si è iniziata la fase operativa che ha previsto l'utilizzo della CFD per la simulazione numerica del processo di combustione. Inizialmente è stato necessario eseguire diverse simulazioni di prova, al fine di prendere confidenza con lo strumento ed accertarsi di non commettere errori nella preparazione dei casi. In questa fase si sono effettuate le prime simulazioni di combustioni innovative, HCCI e PCCI, utilizzando una geometria semplificata, ed è stato definito quale fosse il setup numerico da utilizzare. Successivamente si è passati alla fase di validazione del solutore. *Fiat Powertrain Technologies* ha fornito i dati sperimentali relativi a due diversi motori, uno Diesel (F1C) ed uno PCCI (F1A), al fine di poter simulare con lo strumento CFD il processo di combustione ottenuto in questi motori e confrontare il risultato con quello ottenuto nelle prove reali. Accertatisi dell'affidabilità del solutore si è passati al vero e proprio obiettivo finale di questo lavoro di tesi.

## Scopo del lavoro

Al giorno d'oggi si ha la possibilità di utilizzare la fluidodinamica computazionale in sostituzione alle prove sperimentali. Lo sviluppo di un motore è un processo molto complicato, nel quale si prevede la progettazione e la successiva fase di test di diversi prototipi. È solitamente necessario passare dalla produzione di diversi prototipi intermedi prima di arrivare alla versione finale. Un processo di questo tipo richiede necessariamente una grande quantità di tempo e di risorse.

Grazie alle simulazioni CFD si vorrebbe poter affinare il progetto senza dover necessariamente costruire ognuno dei prototipi intermedi che consentono di arrivare al risultato finale. A tal fine è necessario accertarsi dell'affidabilità del solutore, in modo da poter ritenere veritieri i risultati ottenuti, in mancanza di un riscontro sperimentale.

Si è utilizzato quindi il solutore della cinetica chimica dettagliata per testare se un progetto di un motore può effettivamente ottenere il risultato sperato. *Fiat Powertrain Technologies* ha fornito le informazioni necessarie per effettuare un test di funzionamento di un motore in fase progettuale. Non si tratta quindi di un motore concreto ma di un'idea, descritta da una geometria e da una condizione operativa. Si è verificato se il motore così come da progetto potesse ottenere efficientemente una combustione sia di tipo Diesel che di tipo PCCI. L'obiettivo finale è lo sviluppo di un motore dal funzionamento duale, che permetta una combustione efficiente e pulita in condizioni PCCI, ove questa sia sostenibile, ed una combustione Diesel nei restanti punti operativi.

### Materiali utilizzati

*Fiat Powertrain Technologies* ha fornito le rilevazioni sperimentali e le condizioni operative riguardanti il funzionamento di due motori reali, l'F1C (Diesel) e l'F1A (PCCI). In seguito alla validazione del solutore, *Fiat Powertrain Technologies* ha fornito anche la geometria e la condizione operativa del nuovo motore in fase progettuale, l'F1C-PCCI. Le simulazioni di combustione svolte per la riproduzione del funzionamento di questi motori sono state svolte con l'utilizzo dei seguenti codici:

- OpenFOAM: codice *open source* per la soluzione di problemi di fluidodinamica computazionale.
- LibICE: libreria per la simulazione dei motori a combustione interna. Sviluppata dal gruppo di ricerca sui motori a combustione interna del Politecnico di Milano.

Per la visualizzazione e l'elaborazione dei risultati ottenuti sono stati utilizzati i seguenti strumenti software:

- Paraview: software di grafica utilizzato per visualizzare la distribuzione delle grandezze fisiche nel dominio computazionale.
- Gnuplot: software per la creazione di grafici utilizzato per il confronto dei profili di pressione, di rilascio del calore e delle produzioni di inquinanti ottenuti dalle simulazioni.
- Foglio di calcolo: utilizzato per elaborare i risultati ed ottenere alcuni parametri per la valutazione dell'efficienza di combustione.

## Risultati e conclusioni

Grazie allo studio effettuato si è dimostrato che è possibile utilizzare un solutore CFD per prevedere correttamente lo sviluppo della combustione in un motore PCCI. Un approccio dettagliato alla chimica si dimostra fondamentale per tale obiettivo. Per simulare correttamente il processo, ed ottenere una previsione corretta del ritardo d'accensione, è stato dimostrato che è necessario una operazione di divisione in zone sufficientemente fine secondo il parametro Z1 (rapporto di equivalenza progressivo) utilizzato dall'algoritmo CCM. Per tale parametro si è trovato ed utilizzato un valore che rappresenta un buon compromesso fra accuratezza e velocità di calcolo.

Si è testato il funzionamento del motore in fase progettuale, l'F1C-PCCI, il quale ha mostrato di poter funzionare sia in modalità Diesel che in modalità PCCI. In particolare, la condizione operativa testata per il funzionamento PCCI si è dimostrata particolarmente efficiente, e si è data una spiegazione dei fenomeni che caratterizzano il processo e permettono di ottenere questo risultato. Per tale modalità di funzionamento, si è trovata la condizione operativa che ottimizza il processo di combustione, permettendo di ottenere il valore di efficienza massimo riducendo il valore finale di concentrazione di particolato. Si dimostra anche che la turbolenza gioca un ruolo fondamentale nell'ottenimento di un processo efficiente. In particolare, si sottolinea che l'interazione fra il moto di squish e lo spray possono generare dei moti vorticosi che facilitano l'operazione di preparazione della carica.

Infine si dimostra che la regolazione del motore F1C-PCCI è particolarmente critica. Come prima prova si è provato a variare il momento di iniezione del combustibile, al fine di capire se questa potesse essere utilizzata come una strategia di controllo semplice ed efficace. L'efficienza si è mostrata buona solo variando questo parametro all'interno di un piccolo intervallo. Per ottenere un buon rendimento anche per valori iniezioni molto ritardate o anticipate, si dimostra che sarebbe necessario poter controllare il valore di inclinazione dello spray di combustibile, al fine di mantenere sempre lo stesso punto di impatto dello spray di combustibile. Infatti, per ottenere un buon miscelamento della carica, è necessario che lo spray colpisca il bordo superiore della tazza del pistone; così facendo, il flusso di combustibile viene deviato nelle due direzioni opposte della camera, garantendo una maggior omogeneizzazione della carica. Questo non è però possibile al giorno d'oggi utilizzando i sistemi di iniezione tradizionali, e non si può avere la certezza che in futuro vengano commercializzati sistemi di iniezioni adattivi. Si evidenzia che, in mancanza della possibilità di correggere l'inclinazione dello spray, in queste condizioni operative non ottimizzate si può variare il valore di EGR al fine di ottenere un processo di ossidazione più completo. Un'altra possibilità è quella di aumentare la temperatura del combustibile, permettendo così una miglior evaporazione; di conseguenza viene facilitato il processo di miscelamento della carica.

Tuttavia questa strategia è di difficile applicazione nel mondo reale.

L'unica strategia che potrebbe essere messa in atto utilizzando la tecnologia odierna, quando si cerca di ottenere un risultato efficiente in una condizione operativa non ottimizzata, è la variazione dell'EGR.

Sono necessari ulteriori studi al fine di trovare una strategia per poter controllare il motore PCCI, che permetta di ottenere in ogni condizione operativa un funzionamento efficiente. Se questo non fosse possibile, si concluderebbe che la combustione PCCI è inadatta per applicazioni in condizioni molto variabili, e che dovrebbe essere quindi utilizzata a carico e regimi costanti.

# Indice

<b>1</b>	<b>Motori e combustione</b>	<b>1</b>
1.1	Introduzione alla combustione . . . . .	1
1.1.1	Descrizione . . . . .	1
1.1.2	Regime di combustione e tipi di fiamma . . . . .	3
1.2	Panoramica dei motori tradizionali in uso . . . . .	5
1.2.1	Motore SI (Spark Ignition) . . . . .	5
1.2.2	Motore CI (Compression Ignition) . . . . .	6
1.3	Combustione nel motore Diesel Tradizionale . . . . .	6
1.4	LTC (Low Temperature Combustion) . . . . .	10
1.4.1	Descrizione . . . . .	10
1.4.2	Two stage ignition . . . . .	12
<b>2</b>	<b>Modalità di combustione HCCI e PCCI</b>	<b>15</b>
2.1	Combustione HCCI . . . . .	15
2.1.1	Descrizione ed obiettivi . . . . .	15
2.1.2	Rilascio del calore . . . . .	17
2.1.3	Produzione di inquinanti . . . . .	18
2.1.4	Vantaggi e problematiche . . . . .	18
2.2	Combustione PCCI . . . . .	20
2.2.1	Descrizione ed obiettivi . . . . .	20
2.2.2	Rilascio del calore . . . . .	23
2.2.3	Produzione di inquinanti . . . . .	24
2.2.4	Vantaggi e problematiche . . . . .	24
2.2.5	Caratteristiche dei motori PCCI . . . . .	25
<b>3</b>	<b>La simulazione numerica della combustione nei MCI</b>	<b>29</b>
3.1	La fluidodinamica computazionale . . . . .	30
3.1.1	Le equazioni della Fluidodinamica . . . . .	32
3.1.2	Il metodo ai volumi finiti . . . . .	36
3.2	Simulazione di combustione in un MCI . . . . .	37
3.2.1	Il toolbox OpenFOAM . . . . .	37
3.2.2	La Libreria LibICE . . . . .	38

3.3	Il solutore della chimica dettagliata . . . . .	39
3.3.1	Le tecniche per la riduzione del tempo di calcolo della chimica . . . . .	41
3.3.2	Chemistry Coordinate Mapping . . . . .	41
3.3.3	Riduzione del meccanismo di reazione . . . . .	48
3.3.4	Tabulazione . . . . .	50
<b>4</b>	<b>Preparazione di un caso e simulazioni di prova</b>	<b>51</b>
4.1	Preparazione di un caso . . . . .	51
4.1.1	Movimentazione della griglia . . . . .	52
4.1.2	Creazione del caso e Pre-Processing . . . . .	55
4.1.3	Processing e Post-Processing . . . . .	62
4.2	Il motore CFR . . . . .	66
<b>5</b>	<b>I motori F1C ed F1A</b>	<b>71</b>
5.1	Simulazione di combustione Diesel tradizionale nel motore F1C . . . . .	71
5.1.1	Condizione operativa e dati sperimentali . . . . .	72
5.1.2	Discussione dei risultati . . . . .	74
5.2	Simulazione di combustione PCCI nel motore F1A . . . . .	80
5.2.1	Condizione operativa e dati sperimentali . . . . .	80
5.2.2	Caratteristiche . . . . .	82
5.2.3	Discussione dei risultati . . . . .	83
5.2.4	Influenza del meccanismo di reazione . . . . .	90
5.3	Analisi di funzionamento del CCM in condizioni LTC . . . . .	94
<b>6</b>	<b>Il motore F1C-PCCI</b>	<b>99</b>
6.1	Descrizione del progetto F1C-PCCI . . . . .	99
6.1.1	Condizioni operative e geometria . . . . .	100
6.1.2	Valutazione dei risultati ottenuti . . . . .	101
6.2	Simulazione di combustione nel motore F1C-PCCI . . . . .	103
6.2.1	Funzionamento in modalità PCCI . . . . .	104
6.2.2	Funzionamento in modalità Diesel . . . . .	112
6.3	Analisi del funzionamento al variare dei parametri operativi . . . . .	116
6.3.1	Effetto della variazione del SOI . . . . .	116
6.3.2	Influenza dell'inclinazione dello spray . . . . .	120
6.3.3	Influenza degli altri parametri operativi . . . . .	122
6.3.4	Iniezioni multiple . . . . .	126
6.3.5	Conclusioni tratte dall'analisi svolta . . . . .	130
	<b>Conclusioni</b>	<b>131</b>
	<b>Lista dei simboli</b>	<b>133</b>



<b>Lista degli acronimi</b>	<b>136</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>137</b>



## Elenco delle figure

1.1	Raffigurazione di una fiamma premiscelata . . . . .	3
1.2	Raffigurazione di una fiamma diffusiva . . . . .	4
1.3	Struttura dello spray di combustibile nella fase quasi-stazionaria . . . . .	7
1.4	Fase di combustione premiscelata nel motore Diesel . . . . .	8
1.5	Andamento della pressione e del tasso di rilascio del calore (motore Diesel) . . . . .	9
1.6	Confronto delle zone operative delle generiche LTC, HCCI, PCCI e Diesel Tradizionale nel piano Rapporto di Equivalenza - Temperatura . . . . .	11
1.7	Rilascio di calore istantaneo ottenuto dall'ossidazione di n-Eptano in condizioni LTC . . . . .	12
1.8	Temperatura e specie chimiche durante la combustione LTC . . . . .	13
2.1	Combustione nei Motori tradizionali e nel Motore HCCI . . . . .	16
2.2	Rilascio del calore istantaneo in un motore HCCI che utilizza n-Eptano . . . . .	17
2.3	Visualizzazione della chemiluminescenza associata alla combustione di una miscela omogenea e di una miscela con un certo grado di disomogeneità . . . . .	19
2.4	Confronto fra <i>Port Injection</i> (HCCI), <i>Early Injection</i> e <i>Late Injection</i> (PCCI) . . . . .	21
2.5	Profili di pressione e di rilascio del calore nel caso di <i>Early Injection</i> e <i>Late Injection</i> . . . . .	23
2.6	Esempi di impingement sul pistone (a sinistra) e sul cilindro (a destra) . . . . .	26
2.7	Sezione del volume interno di un motore . . . . .	27
3.1	Esempio di un volume di controllo caratterizzato dalla grandezza intensiva $\phi$ . . . . .	34
3.2	Generica cella del dominio (a sinistra) ed esempio di una griglia (a destra) . . . . .	37
3.3	Schematizzazione dello strumento LibICE . . . . .	39
3.4	Procedura per la mappatura proposta da Babajimopoulos . . . . .	43
3.5	Esempio di schema creato dal metodo DRG . . . . .	49

4.1	Esempio di griglia che costituisce una frazione del volume interno di un motore . . . . .	52
4.2	Patch che costituiscono la superficie di contorno della griglia . . . . .	53
4.3	Distribuzione ZT in un motore PCCI, a diversi angoli di manovella . . . . .	66
4.4	Griglia del motore CFR . . . . .	66
4.5	Profili di pressione ottenuti in modalità HCCI e PCCI (CFR) . . . . .	67
4.6	Concentrazione degli ossidi di azoto (CFR) . . . . .	69
4.7	Concentrazione del monossido di carbonio (CFR) . . . . .	69
4.8	Concentrazione di particolato (CFR) . . . . .	69
5.1	Griglia utilizzata per simulare il motore F1C . . . . .	72
5.2	Confronto del profilo di pressione sperimentale con quello ottenuto dai solutori CTC e CCM (F1C) . . . . .	75
5.3	Confronto del tasso di rilascio di calore sperimentale con quello ottenuto dai solutori CTC e CCM (F1C) . . . . .	75
5.4	Combustione ottenuta nel motore F1C . . . . .	75
5.5	Concentrazione degli ossidi di azoto (F1C) . . . . .	77
5.6	Concentrazione del monossido di carbonio (F1C) . . . . .	77
5.7	Concentrazione del particolato (F1C) . . . . .	77
5.8	Presenza di liquido e HRR (F1C) . . . . .	79
5.9	Distribuzione Z-T nelle prime fasi (F1C) . . . . .	79
5.10	Distribuzione Z-T durante la combustione (F1C) . . . . .	79
5.11	Griglia utilizzata per simulare il motore F1A . . . . .	80
5.12	Spray e distribuzione di Z (F1A) . . . . .	84
5.13	Campo di moto durante e dopo l'iniezione (F1A) . . . . .	84
5.14	Confronto del profilo di pressione (F1A) . . . . .	86
5.15	Confronto del rilascio del calore (F1A) . . . . .	86
5.16	Zone in cui comincia la fase principale di rilascio del calore (F1A) . . . . .	86
5.17	Concentrazione degli ossidi di azoto (F1A) . . . . .	87
5.18	Concentrazione del monossido di carbonio (F1A) . . . . .	87
5.19	Concentrazione del particolato (F1A) . . . . .	87
5.20	Presenza di liquido e HRR (F1A) . . . . .	89
5.21	Distribuzione Z-T della prima ignizione (F1A) . . . . .	89
5.22	Distribuzione Z-T della seconda ignizione (F1A) . . . . .	89
5.23	Influenza del meccanismo di reazione - Pressione (F1A) . . . . .	91
5.24	Influenza del meccanismo di reazione - Rilascio del calore (F1A) . . . . .	92
5.25	Schema dettagliato e ridotto: confronto $NO_x$ . . . . .	93
5.26	Schema dettagliato e ridotto: confronto CO . . . . .	93
5.27	Schema dettagliato e ridotto: confronto particolato . . . . .	93
5.28	Influenza del parametro Z1zone.Span sulla forma della curva HRR . . . . .	94

5.29	Variazione nella distribuzione del perossido di idrogeno al variare del valore di <i>span</i> di Z1, durante il regime NTC. . . . .	95
5.30	Distribuzione ZT all'istante -15 CAD . . . . .	96
5.31	Distribuzione ZT negli istanti -18 e -17 CAD . . . . .	97
5.32	Influenza del parametro Z1zone.Span sul comportamento della simulazione dopo la prima fase di rilascio del calore . . . . .	98
6.1	Griglia utilizzata per simulare il motore FP . . . . .	101
6.2	Confronto del profilo di pressione del motore F1A con quello del motore FP . . . . .	105
6.3	Confronto del tasso di rilascio di calore del motore F1A con quello del motore FP . . . . .	105
6.4	Zone in cui comincia la fase principale di rilascio del calore (FP) . .	105
6.5	Concentrazione degli ossidi di azoto (FP) . . . . .	107
6.6	Concentrazione del monossido di carbonio (FP) . . . . .	107
6.7	Concentrazione del particolato (FP) . . . . .	107
6.8	Presenza di liquido e HRR (FP) . . . . .	108
6.9	Distribuzione Z-T nelle prime fasi (FP) . . . . .	108
6.10	Distribuzione Z-T durante la combustione (FP) . . . . .	108
6.11	Processo di miscelamento nel motore FP (SOI=-35) . . . . .	110
6.12	Profilo di pressione in modalità PCCI e Diesel (FP) . . . . .	114
6.13	Rilascio del calore in modalità PCCI e Diesel (FP) . . . . .	114
6.14	Combustione Diesel nel motore FP . . . . .	114
6.15	Concentrazione degli ossidi di azoto (FP Diesel) . . . . .	115
6.16	Concentrazione del monossido di carbonio (FP Diesel)) . . . . .	115
6.17	Concentrazione di particolato (FP Diesel) . . . . .	115
6.18	Risultati ottenuti variando il SOI nell'intorno del valore di riferimento (FP) . . . . .	117
6.19	Influenza di una grande variazione di SOI (FP) . . . . .	118
6.20	Confronto delle prestazioni del motore FP al variare del SOI . . . .	119
6.21	Correzione dell'inclinazione dello spray per ristabilire il punto di impatto sul bordo della tazza del pistone . . . . .	120
6.22	Profili di pressione al variare del targeting (FP) . . . . .	121
6.23	Variazione di efficienza di combustione, produzione di CO e particolato al variare del targeting (FP) . . . . .	122
6.24	Effetto della variazione dello spray e della riduzione dell'EGR (FP)	123
6.25	Confronto delle prestazioni del motore FP al variare del SOI . . . .	125
6.26	Legge di iniezione singola e legge di iniezione tripla (FP) . . . . .	126
6.27	Profilo di pressione ottenuto utilizzando l'iniezione tripla (FP) . . .	127
6.28	Punti di impatto relativi alle singole iniezioni (iniezione tripla) . . .	128
6.29	Campo di moto nel caso di iniezione tripla e singola (FP) . . . . .	129



# Abstract

Subject of this work is the CFD analysis of PCCI combustion in heavy duty engines. First the CFD solver is validated by comparing its results with experimental data from two different engines. Then it is demonstrated that a detailed approach to chemistry is needed in order to have a good prediction of auto-ignition phenomenon. A new engine project is tested to check if good results can be obtained both in Diesel combustion and in PCCI combustion mode. The influence of the following parameters is investigated: SOI, EGR, spray targeting and fuel temperature. The results obtained have shown that efficiency is high only in a narrow region around the optimized value of SOI. Outside this region, different values of EGR and fuel temperature could be used in order to enhance oxidation and mixing processes. The PCCI combustion process is hard to control in the engine considered. Further studies are needed to find efficient control strategies.

**Keywords:** Premixed Charge Compression Ignition (PCCI); CCM (Chemistry Coordinate Mapping); detailed kinetics; mixing; turbulence; spray





# Sommario

In questa tesi si è effettuata un'analisi CFD volta allo studio della combustione PCCI in motori industriali di grande taglia. Lo studio si è focalizzato inizialmente sulla validazione del solutore, effettuata confrontando i risultati delle simulazioni con dati sperimentali di due motori differenti. Viene dimostrato che per prevedere correttamente il fenomeno dell'auto-accensione nei motori PCCI è necessario un approccio dettagliato alla cinetica chimica. Le simulazioni hanno poi permesso di verificare la possibilità di funzionamento duale di un motore in fase di progettazione, il quale consente di ottenere un buon rendimento sia in modalità Diesel che in modalità PCCI. In seguito si è cercato di studiare il comportamento del motore al variare dei principali parametri operativi e di controllo: SOI, ricircolo dei gas combusti, inclinazione dello spray e temperatura del combustibile. I risultati ottenuti hanno messo in evidenza che l'efficienza del processo è accettabile solo in un campo ristretto di valori di SOI. Si è sottolineata l'importanza dello spray targeting e dei moti turbolenti al fine di ottenere un buon processo di miscelamento. La correzione di parametri quali il grado di EGR e la temperatura del combustibile permettono di aumentare leggermente l'efficienza del processo nel campo di funzionamento a SOI non ottimizzato. Si conclude che la regolazione della combustione in questo motore è problematica. Si evidenzia la necessità di condurre ulteriori studi al fine di trovare delle strategie di controllo efficienti.

**Keywords:** Premixed Charge Compression Ignition (PCCI); CCM (Chemistry Coordinate Mapping); chimica dettagliata; miscelamento; turbolenza; spray



# Capitolo 1

## Motori e combustione

I motori a combustione interna sono una risorsa fondamentale nella società moderna, trovando applicazione soprattutto come propulsori per veicoli (terrestri, marini e piccoli velivoli) e come mezzi di produzione di potenza per impianti fissi e mobili (generatori di elettricità ed attrezzi portatili).

Un motore a combustione interna è una macchina motrice termica, che consente di convertire parte dell'energia termica rilasciata dall'ossidazione di un combustibile in lavoro meccanico [1]. La combustione ed il rilascio di calore avvengono in seno al fluido di lavoro, il quale interagisce con gli organi mobili del motore scambiando lavoro e permettendo la produzione di potenza meccanica. Gli attuali motori per autotrazione operano principalmente con due diverse tipologie di combustione: accensione comandata (motore SI - spark ignition) ed accensione per compressione (motore CI - compression ignition).

In questo capitolo si introdurrà la combustione in forma generica, dando particolare attenzione alla modalità di accensione del combustibile ed alla formazione di sostanze inquinanti. Si parlerà poi delle tipologie di motori maggiormente diffuse, di come si ottiene la combustione ed il relativo rilascio del calore, per ogni tipologia si elencheranno poi i relativi vantaggi e svantaggi. Infine si passerà alla descrizione delle *combustioni innovative*, vero oggetto di studio di questa tesi, ossia nuove tipologie di combustione che hanno come obiettivo quello di contenere le emissioni di inquinanti senza dover rinunciare ad efficienza e versatilità.

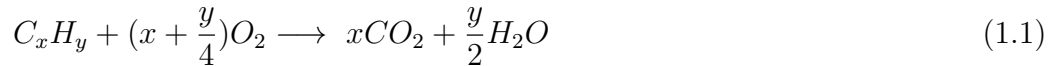
### 1.1 Introduzione alla combustione

#### 1.1.1 Descrizione

La combustione è l'evento associato al verificarsi di alcune reazioni chimiche che hanno come risultato finale l'ossidazione di un combustibile in contatto con un comburente. Il processo è caratterizzato da un forte rilascio di calore e dalla emissione di radiazioni elettromagnetiche, tra cui spesso anche radiazioni luminose.

Si tratta di un evento molto complicato che prevede la formazione di specie molto reattive dette *specie radicaliche* o *radicali*, le quali portano ad un veloce susseguirsi di interazioni chimiche che gradualmente scompaiono ed ossidano il combustibile.

La reazione di ossidazione di un idrocarburo generico, in condizioni stechiometriche, si può scrivere



che descrive semplicemente la direzione in cui questa procede e quali sono i principali prodotti, con  $x$  che indica il numero di atomi di carbonio ed  $y$  il numero di atomi di idrogeno contenuti nella molecola. L'equazione 1.1 non fornisce alcun tipo di informazione riguardo il reale modo in cui la reazione si svolge, è necessario quindi disporre di ulteriori equazioni che descrivano gli atti elementari che portano al risultato indicato. Questo set di equazioni viene chiamato meccanismo di reazione e caratterizza il comportamento di ogni tipo di combustibile.

Si riporta come esempio il meccanismo di reazione ridotto del normal-eptano proposto da Bollig et al. [2]:

- (i)  $C_7H_{16} = C_3H_6 + 2C_2H_4 + H_2$
- (ii)  $2C_3H_6 = 3C_2H_4$
- (iii)  $C_2H_4 = C_2H_2 + H_2$
- (iv)  $C_2H_2 + 2H_2O + 2H = 4H_2 + 2CO$
- (v)  $CO + H_2O = CO_2 + H_2$
- (vi)  $2H + M = H_2 + M$
- (vii)  $O_2 + 3H_2 = 2H + 2H_2O$

il quale, nonostante rappresenti una estrema semplificazione del meccanismo completo, permette però di capire il ruolo delle specie intermedie che si formano durante il processo, alcune delle quali ricoprono un ruolo chiave nella formazione degli inquinanti. Nei meccanismi di reazione completi la quantità di specie e reazioni chimiche coinvolte è molto alta, anche per i combustibili a struttura più semplice, e cresce notevolmente per i combustibili a struttura complessa. Per dare una idea degli ordini di grandezza, il meccanismo cinetico che porta all'ossidazione di un idrocarburo quale benzina o gasolio, può coinvolgere centinaia di specie chimiche e migliaia di reazioni chimiche diverse [3].

Dei meccanismi di reazione e delle specie chimiche coinvolte si parlerà più approfonditamente nei prossimi capitoli, quando si passerà alla descrizione delle simulazioni di combustione effettuate per questo lavoro di tesi.

### 1.1.2 Regime di combustione e tipi di fiamma

Per facilitare lo studio e la comprensione del fenomeno della combustione si fa solitamente riferimento a due classificazioni, utili per caratterizzare il tipo di fiamma che si instaura nel sistema:

- Laminare / Turbolenta
- Premiscelata / Non premiscelata

La prima delle due classificazioni riguarda il regime del flusso, la seconda riguarda invece la tipologia di mix combustibile-comburente ed è quella su cui ci soffermeremo brevemente.

Queste categorie forniscono una chiave di lettura intuitiva del fenomeno, necessaria per poterne efficacemente descrivere il comportamento.

**Fiamma premiscelata** Questo modello prevede la propagazione di un fronte di fiamma all'interno di una miscela omogenea di combustibile e comburente.

La figura 1.1 ne mette in mostra la struttura e fornisce una indicazione qualitativa dei profili delle principali grandezze coinvolte:

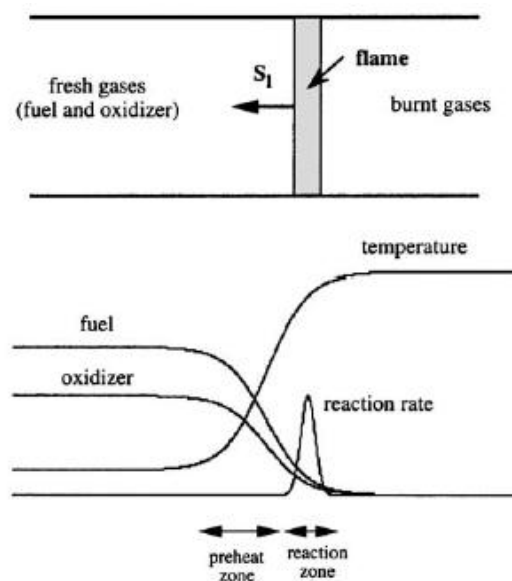


Figura 1.1: Rappresentazione di una fiamma premiscelata

Per ottenere questo tipo di fiamma, combustibile e comburente devono essere precedentemente miscelati fino ad ottenere una miscela omogenea e quindi a rapporto di equivalenza uniforme, completamente gassosa. Il termine "propagazione" prevede che la combustione sia innescata in un punto particolare della miscela e che

da questo la fiamma si possa propagare e possa accendere il resto della miscela. All'inizio del processo si ha un dominio omogeneo costituito dalla miscela reagente, successivamente all'innesco della combustione si potranno invece identificare tre zone distinte: il fronte di fiamma o zona di reazione, la zona dei reagenti contenente miscela "fresca" e la zona dei prodotti contenente gas combusti. Il fronte di fiamma può essere solo approssimativamente considerato come spartiacque fra le altre due zone, in quanto per effetti diffusivi si avrà una certa quantità di prodotti nella zona dei reagenti e viceversa.

I principali fattori che influiscono sulla propagazione di tale tipologia di fiamma sono la composizione chimica della miscela, le proprietà termofisiche della miscela (in particolare la diffusività termica), pressione e temperatura. Importante infine sottolineare che, nonostante la carica sia premiscelata e quindi combustibile e comburente siano già in contatto, nella zona di reazione svolge un ruolo molto importante anche la diffusione di massa.

**Fiamma diffusiva** Questo modello prevede invece la formazione di un fronte di fiamma in corrispondenza di un'interfaccia fra due zone diverse presenti all'istante iniziale, una contenente solo combustibile e l'altra solo comburente ed entrambe allo stato gassoso. La figura 1.2 ne mette in mostra la struttura e fornisce una indicazione qualitativa dei profili delle principali grandezze coinvolte:

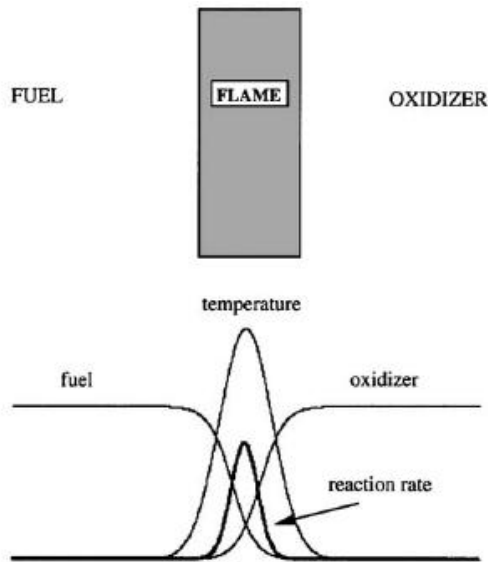


Figura 1.2: Rappresentazione di una fiamma diffusiva

Quindi all'istante iniziale il dominio non è omogeneo come nel caso precedente, e si considera che la fiamma si instaura a cavallo fra le due zone quando ancora non c'è stata una significativa miscelazione. Affinchè la combustione proceda, il

combustibile deve essere in grado di diffondere verso il comburente, e viceversa il comburente deve diffondere in senso opposto, entrambi con una velocità sufficiente a far fronte alla quantità consumata nella zona di reazione. Questa tipologia di fiamma è significativamente diversa da quella descritta precedentemente, in quanto è meno influenzata da aspetti di cinetica chimica (come composizione chimica del combustibile, temperatura, pressione) ed è maggiormente controllata dall'entità dello scambio di massa fra le due zone.

## 1.2 Panoramica dei motori tradizionali in uso

### 1.2.1 Motore SI (Spark Ignition)

Il motore SI è un motore nel quale l'accensione del combustibile viene comandata tramite un elemento chiamato candela, che ha il compito di accendere la miscela al momento opportuno rilasciando una piccola quantità di energia.

Questo motore utilizza una carica aria/combustibile premiscelata con rapporto di equivalenza globale tale da essere nel campo di infiammabilità. L'accensione del combustibile avviene in un punto localizzato della camera di combustione grazie ad una piccola scarica elettrica, la quale permette localmente di superare l'energia di attivazione necessaria ad avviare le reazioni di ossidazione. Il calore rilasciato in questa zona deve essere tale da diffondersi verso le zone limitrofe e far procedere le reazioni di ossidazione ad una velocità sufficiente per l'autosostentamento, si deve creare quindi un fronte di fiamma che prosegua fino a dove sussistono le condizioni di propagazione. Le emissioni di inquinanti associate a questo motore si compongono soprattutto di ossidi di azoto, per quanto riguarda invece il particolato si hanno emissioni nulle o quasi nulle vista la tipologia di carica utilizzata. Questo aspetto costituisce un grande punto di forza del motore SI [4].

La necessità di ridurre le emissioni di idrocarburi incombusti, monossido di carbonio e  $\text{NO}_x$  con un catalizzatore trivalente costringono questo motore a funzionare con un rapporto di miscela vicino al valore stechiometrico, di conseguenza il funzionamento ai carichi parziali risulta penalizzato in quanto prevede la riduzione della quantità di aria aspirata e quindi l'aumento del lavoro necessario per il ciclo di pompaggio [5].

Il rapporto di compressione tipico di questo motore è compreso nell'intervallo 8-13. Il limite superiore è solitamente limitato dall'insorgenza dei fenomeni di detonazione, molto pericolosi in un motore a carica premiscelata.

Questo aspetto, insieme al precedente, fanno sì che l'efficienza del motore SI sia limitata.

### 1.2.2 Motore CI (Compression Ignition)

Nel motore CI invece, l'accensione del combustibile avviene per compressione, temperatura e pressione nel cilindro aumentano fino a creare le condizioni di autoignizione del combustibile. Il combustibile viene solitamente introdotto alla fine della fase di compressione, nel momento in cui la combustione può cominciare; non si viene quindi limitati dal fenomeno del battito in testa e può essere adottato un alto rapporto di compressione (valori tipici 12-24). A differenza del motore SI non deve essere rispettato un particolare rapporto di equivalenza globale per rendere possibile la propagazione di un fronte di fiamma, pertanto la regolazione del carico può essere effettuata variando semplicemente la quantità di combustibile introdotta lasciando invariata la portata di aria aspirata, così facendo si riduce l'effetto penalizzante del ciclo di pompaggio. Questi due fattori fanno sì che l'efficienza del motore CI sia superiore rispetto a quella dei motori SI.

Come detto precedentemente, nel motore SI la combustione è caratterizzata dal momento di accensione imposto dalla candela e da fenomeni di propagazione del fronte di fiamma. Nel motore CI invece è principalmente il miscelamento fra combustibile e comburente a controllare il processo. In questa modalità il combustibile viene introdotto nella camera di combustione quando già sussistono le condizioni per l'autoignizione, facendo sì che i tempi caratteristici della cinetica chimica siano di ordini di grandezza inferiori rispetto a quelli fisici di preparazione di una miscela che sia in grado di accendersi, di conseguenza la chimica si trova ad essere limitata dalla fisica.

Nei motori CI, la principale causa di formazione di  $\text{NO}_x$  è legata alle alte temperature ed è descrivibile dal meccanismo termico di Zeldovich [6].

La produzione di particolato è invece dovuta alla presenza di zone ricche di combustibile, nelle quali la scarsità di ossigeno non permette la corretta ossidazione delle catene di atomi di carbonio in esso presenti; queste catene si aggregano fra di loro fino a creare piccole sfere [7].

La creazione di zone ricche di combustibile e di zone ad alta temperatura causano la produzione di grandi quantità di particolato e  $\text{NO}_x$ , soprattutto queste ultime non possono essere controllate efficientemente con metodi a basso costo come nei motori SI, rendendo talvolta necessari sofisticati sistemi di post-trattamento.

## 1.3 Combustione nel motore Diesel Tradizionale

In questo paragrafo viene descritto il funzionamento del motore Diesel tradizionale ovvero il più diffuso dei motori CI. Questa descrizione sarà utile per poter confrontare altre tipologie di motori che verranno introdotti più avanti, con le quali condivide diversi aspetti operativi.

I motori Diesel attuali prevedono l'immissione diretta di combustibile nel cilindro,



solitamente suddivisa in iniezioni multiple ad alta pressione. L'iniezione principale viene solitamente preceduta da una o due iniezioni pilota, che hanno l'obiettivo di ridurre la rumorosità di combustione e la produzione di inquinanti (principalmente HC e CO) [8].

Come combustibile si usa gasolio, il quale viene iniettato in forma liquida all'interno della camera di combustione con una pressione di iniezione molto elevata, si forma quindi uno spray di goccioline molto fini di cui analizzeremo ora la struttura. L'iniezione di combustibile ha in genere una durata sufficientemente lunga tale da essere caratterizzata da una fase quasi-stazionaria, durante la quale si ha simultaneamente combustione ed iniezione del combustibile e la struttura dello spray non varia. La figura 1.3 descrive la struttura di uno spray nel momento in cui si

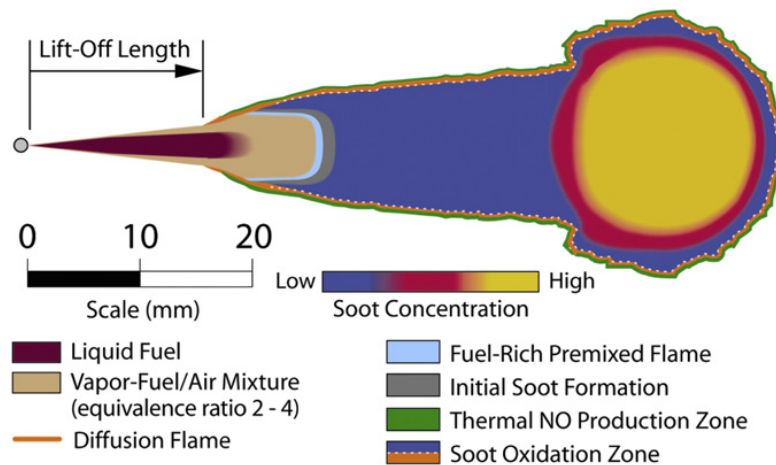


Figura 1.3: Struttura dello spray di combustibile nella fase quasi-stazionaria

sperimenta questa fase di quasi-stazionarietà. Il getto di combustibile liquido esce ad alta velocità dall'ugello dell'iniettore, assumendo una forma conica di larghezza sempre maggiore man mano che i gas caldi contenuti nel cilindro vengono inglobati in questo fronte, variando di conseguenza il rapporto di equivalenza nella direzione assiale dello spray. Per via dell'interazione dello spray con questi gas si ha un progressivo miscelamento, lo scambio termico associato a questo processo porta ad avere la totale evaporazione del combustibile ad una certa distanza dall'ugello, chiamata "liquid length". All'interno dello spray si ha quindi simultanea presenza di fase liquida e fase vapore, generando una combustione di tipo premiscelata in certi punti e di tipo diffusiva in altri. L'evaporazione di una parte del combustibile forma, ad una certa distanza dall'ugello che è possibile notare in figura 1.3, una zona discretamente ricca che brucia in fase premiscelata ad alta temperatura, nella quale vengono prodotti alcuni precursori del particolato. Fra la zona a fiamma premiscelata e i confini dello spray la combustione procede prevalentemente in maniera diffusiva, controllata da fenomeni di evaporazione e miscelamento del combustibile.

le. E' importante notare che nella sua parte iniziale, lo spray non è interessato da alcuna combustione e la fiamma risulta staccata dall'ugello dell'iniettore di una distanza chiamata "lift-off length", grandezza che influisce notevolmente sul rapporto di equivalenza e quindi sulla produzione di inquinanti. La parte dello spray più lontana dall'ugello è caratterizzata da alte temperature ed alto rapporto di equivalenza, condizioni che portano a produrre molto particolato il quale si sommerà a quello precedentemente formato nella zona a fiamma premiscelata. Sul contorno dello spray, grazie alla presenza di ossigeno ed alle temperature provocate dalle fiamme diffusive, si ha una alta produzione di ossidi di azoto. Non è possibile caratterizzare l'evoluzione dello spray e della combustione del motore Diesel considerando solo la fase quasi-stazionaria precedentemente descritta, è infatti molto importante focalizzare l'attenzione anche sulla fase iniziale del processo. Fra l'inizio della fase di iniezione e l'inizio della combustione intercorre un tempo chiamato ritardo d'accensione, durante il quale il combustibile ha la possibilità di evaporare e miscelarsi con i gas caldi contenuti nel cilindro. In questa fase si viene a formare una zona accendibile contenente combustibile e gas caldi premiscelati con rapporto di equivalenza variabile, visibile in figura 1.4 .

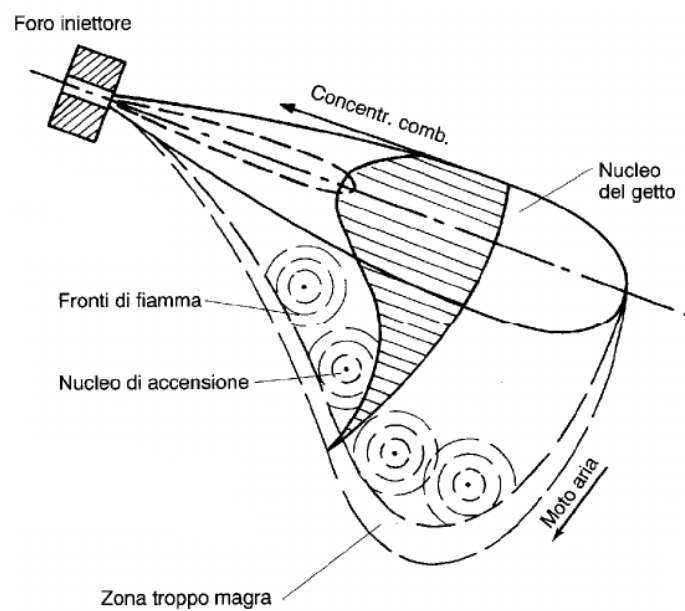


Figura 1.4: Fase di combustione premiscelata nel motore Diesel

I punti più ricchi autoaccendono e conseguentemente portano rapidamente ad

autoaccensione il resto della zona premiscelata, rilasciando una notevole quantità di calore in una quantità limitata di tempo. Il rilascio di calore nei motori Diesel è descrivibile in tre fasi: ritardo d'accensione, combustione premiscelata e combustione "mixing-controlled". In figura 1.5 è possibile apprezzare il profilo della legge

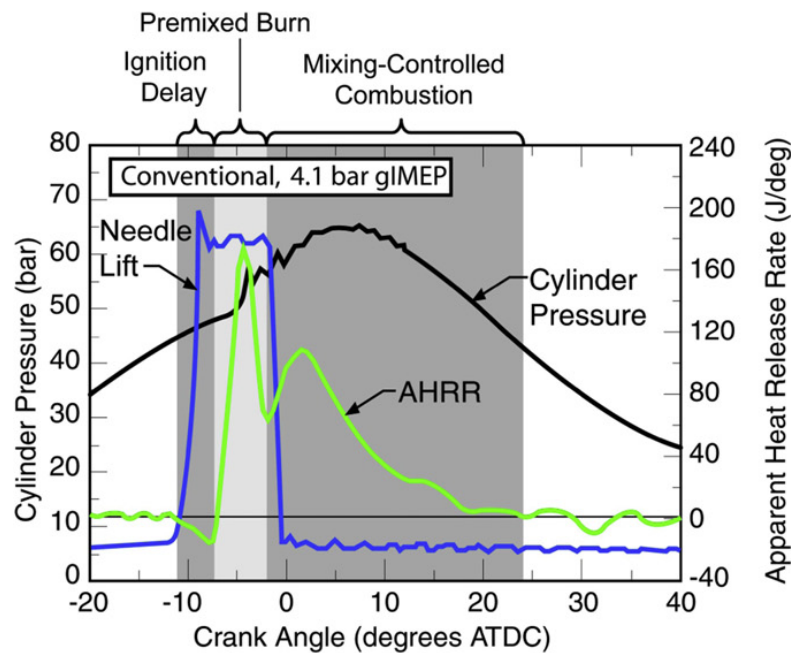


Figura 1.5: Andamento della pressione e del tasso di rilascio del calore (motore Diesel)

di iniezione di combustibile, l'entità del rilascio di calore istantaneo e l'evoluzione della pressione nel cilindro. Al momento dell'iniezione, pressione e temperatura all'interno del cilindro sono tali da creare velocemente le condizioni di autoaccensione (si noti che la pressione varia fra i 45 ed i 60 bar durante il processo). La fase del ritardo d'accensione (*Ignition Delay*) è riconoscibile nella curva del rilascio del calore istantaneo (AHRR, in verde) come un ripiegamento verso il basso che interseca l'asse delle ascisse, indicando che in questa fase il calore viene assorbito per via dell'evaporazione del combustibile. La fase successiva di combustione premiscelata è riconoscibile in quel picco assunto dal calore apparente dal valore di circa  $160 \text{ J/deg}$ . La fase finale della combustione è di tipo *mixing-controlled*, termine che sta ad indicare che la velocità delle reazioni è limitata dai fenomeni di miscelamento. Durante questa fase, il rilascio del calore è inizialmente contenuto e cresce gradualmente fino a presentare un picco pochi gradi di manovella dopo il TDC, per poi decrescere lentamente fino all'esaurimento del combustibile.

Per anni il motore Diesel è stato sviluppato e migliorato, al fine di contenere quei difetti che lo sfavorivano rispetto al motore Otto a benzina. I principali fronti su cui si è lavorato sono stati: incremento della potenza specifica, riduzione della rumorosità, ottimizzazione della curva di coppia e riduzione della produzione di inquinanti. I risultati ottenuti sono stati importanti su tutti i fronti citati, portando il motore Diesel a coprire una importante parte del mercato dell'*automotive*, superando in alcuni casi le vendite del motore Otto a benzina, ad esempio in Italia nel 2014 [9]. Il problema della produzione di inquinanti è però il più difficile da risolvere, ed è strettamente collegato alla tipologia di combustione operata in questi motori, aspetto sul quale il mondo della ricerca sta rivolgendo moltissima attenzione.

## 1.4 LTC (Low Temperature Combustion)

### 1.4.1 Descrizione

Alla luce dei pro e contro delle tipologie precedentemente introdotte, si vorrebbe ideare un nuovo motore che possa ereditare da ognuna gli aspetti positivi e limitare quelli negativi; si vorrebbe quindi ottenere l'efficienza di un motore CI e le basse emissioni tipiche del motore SI. Dopo anni di ricerca e sviluppo sono attualmente disponibili sistemi di post-trattamento in grado di ridurre le emissioni di inquinanti. Questioni di costo, problemi di durata, ingombro e penalizzazione dell'efficienza fanno sì che aumenti sempre più l'interesse verso le strategie di riduzione degli inquinanti "interne". Queste strategie sono atte a ridurre l'emissione di inquinanti prevenendone anzitutto la formazione in camera di combustione.

Un modo per contenere le emissioni di  $NO_x$  senza operare un post-trattamento è l'adozione della combustione a bassa temperatura, detta LTC (Low Temperature Combustion) [10].

La combustione LTC mira a limitare le temperature massime utilizzando miscele ad alto livello di diluizione, quindi contenenti una piccolissima frazione di combustibile a fronte della massa di gas (aria o gas riciclati) all'interno del cilindro. E' importante tenere in considerazione che utilizzare un alto grado di ricircolo dei gas combusti potrebbe limitare le reazioni di ossidazione e quindi l'efficienza di combustione risultante [11]. Dall'altro lato, introdurre solamente aria nel cilindro senza operare un ricircolo dei gas combusti, porterebbe ad avere una grande quantità di ossigeno favorendo la formazione degli ossidi di azoto. In seguito si analizzeranno altri aspetti importanti che è necessario tenere in considerazione per la scelta delle condizioni operative per ottenere una combustione LTC. L'adozione di basse temperature di combustione rallenta considerevolmente la velocità delle reazioni di ossidazione del particolato formatosi, è quindi necessario utilizzare in questi motori una carica premiscelata, così da evitare prima di tutto che questo

inquinante si formi in grandi quantità.

Di seguito si riporta qualche esempio di combustioni LTC:

- HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition)
- PCCI (Premixed Charge Compression Ignition)
- SCCI (Stratified Charge Compression Ignition)
- HCLI (Homogeneous Charge Late Injection)
- HPLI (Highly Premixed Late Injection)
- PPCI (Partially Premixed Compression Ignition)
- DCCS (Dilution Controlled Combustion System)

Negli anni sono stati proposti nuovi nomi ed acronimi per definire queste combustioni innovative, il confine di distinzione è diventato sempre più fine ed in qualche caso le definizioni si sovrappongono. Nel capitolo 2 si tratteranno in maniera approfondita le due tipologie di combustione oggetto di questa tesi, HCCI e PCCI, di cui in figura 1.6 vengono riportate le zone operative in termini di temperature ed eccessi d'aria caratteristici.

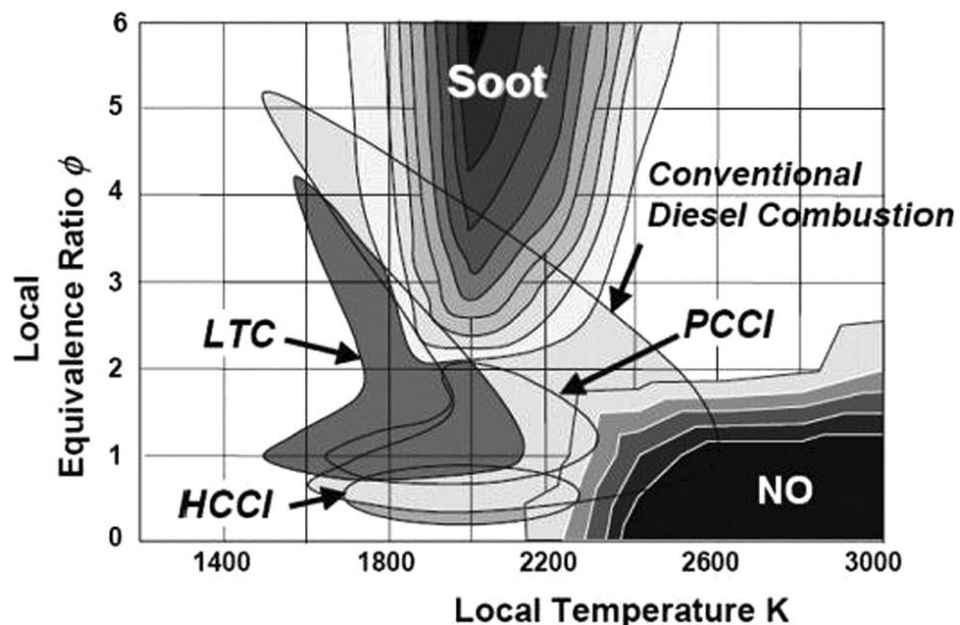


Figura 1.6: Confronto delle zone operative delle generiche LTC, HCCI, PCCI e Diesel Tradizionale nel piano Rapporto di Equivalenza - Temperatura

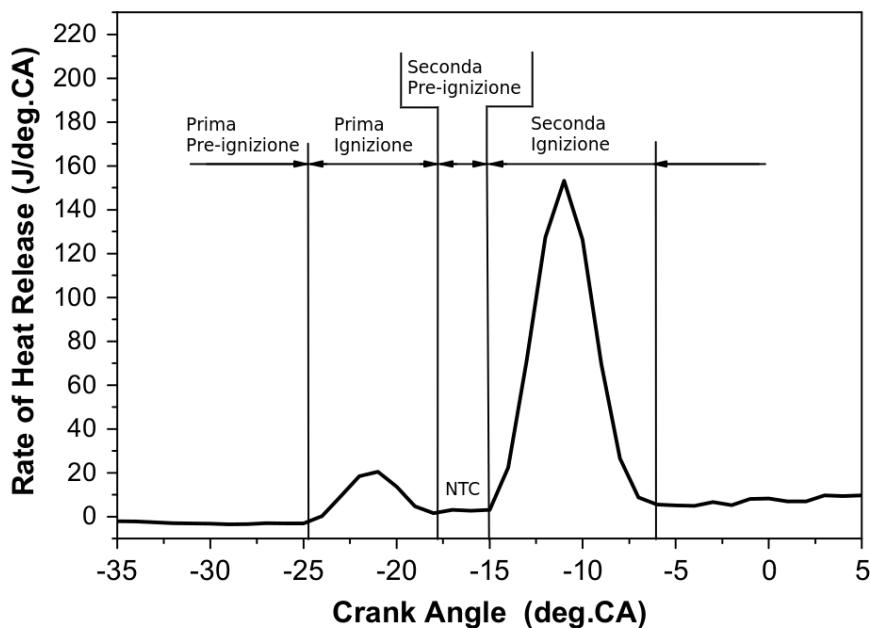


Figura 1.7: Rilascio di calore istantaneo ottenuto dall'ossidazione di n-Eptano in condizioni LTC

### 1.4.2 Two stage ignition

Per comprendere a fondo la combustione LTC ed il suo comportamento, è necessario studiare la cinetica chimica caratteristica delle basse temperature.

In questo lavoro di tesi si vogliono analizzare le combustioni LTC ottenute bruciando combustibili dalle proprietà simili al gasolio tradizionale, il quale è una miscela di diversi idrocarburi fra i quali prevalgono gli alcani lineari a catena lunga. Sono proprio questi ultimi ad influenzare maggiormente il fenomeno dell'autoignizione e lo sviluppo della combustione. Di conseguenza, per replicare il comportamento del gasolio tradizionale, vengono utilizzati come combustibili idrocarburi lineari, caratterizzati da un alto numero di cetano e quindi facilmente accendibili. La scelta ricade spesso sul normal-eptano e sul normal-dodecano, i quali sono sufficientemente simili dal punto delle proprietà fisiche, ma soprattutto si mostrano un valido sostituto per quanto riguarda la previsione del ritardo d'accensione. È comodo riferirsi a combustibili di questo tipo utilizzando l'espressione inglese "diesel-like fuels", che sta ad indicare tutti quegli idrocarburi adatti per l'utilizzo nei motori a ciclo Diesel. La modalità con cui questi combustibili rilasciano il calore è facilmente riconoscibile, identificabile con l'espressione "two stage ignition" [11]

. In figura 1.7 è possibile comprendere la modalità con cui i combustibili *diesel-like* rilasciano il calore quando bruciano a bassa temperatura e con alti gradi di diluizione. Per spiegare quello che avviene durante questo fenomeno si faccia riferimento

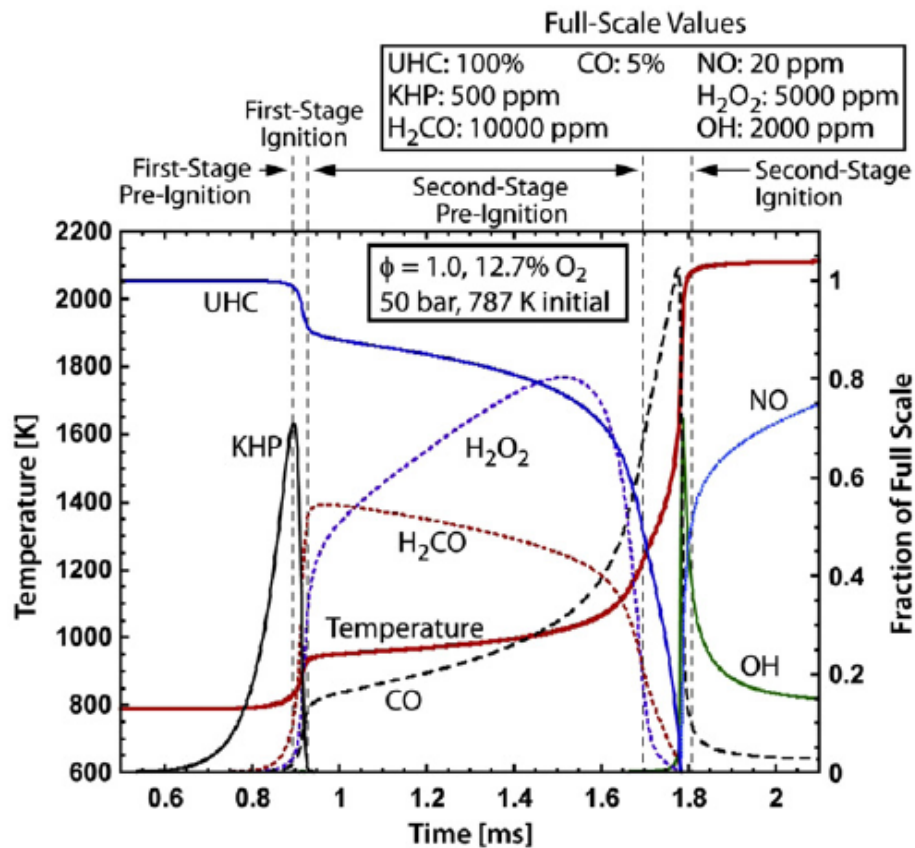


Figura 1.8: Temperatura e specie chimiche durante la combustione LTC

alla figura 1.8, la quale mostra l'evoluzione della temperatura e delle specie chimiche in una simulazione di combustione LTC a pressione costante. Nella "First-Stage Pre-Ignition" riconoscibile in figura, ovvero la prima fase di pre-ignizione la quale è caratterizzata da basse temperature ed alte concentrazioni di idrocarburi (UHC), è favorita la reazione di produzione di una specie relativamente stabile chiamata chetoidroperossido (KHP), che ricopre il ruolo di protagonista in questa fase. Allo stesso momento avvengono varie reazioni di ossidazione che coinvolgono specie radicaliche ed idrocarburi, le quali rilasciano calore innalzando la temperatura. Oltre la temperatura di 850 K la reazione di produzione del chetoidroperossido diviene sfavorita, favorendo invece quella di decomposizione, portando di conseguenza ad un rapido esaurimento della riserva precedentemente formata ed alla creazione di radicali *OH*. La presenza di radicali di questo tipo accelera sensibilmente le reazioni di ossidazione portando alla fine della fase prima fase di pre-ignizione ed all'inizio della prima ignizione, nella quale si ha il primo dei due picchi di calore precedentemente citati. Quando tutto il chetoidroperossido

formato durante la prima fase viene esaurito dalle reazioni di decomposizione, le reazioni di ossidazione subiscono una battuta di arresto dovuta alla scarsità di radicali OH e di conseguenza termina la fase della prima ignizione. In seguito all'esaurimento del KHP si entra nel regime di *coefficiente di temperatura negativo* (NTC), nel quale il rilascio di calore rallenta sensibilmente nonostante una lenta crescita della temperatura. Il regime NTC coincide con la seconda fase di pre-ignizione, nella quale si hanno altre specie nel ruolo di protagonisti del processo: formaldeide ( $H_2CO$ ), perossido di idrogeno ( $H_2O_2$ ) e monossido di carbonio ( $CO$ ). La formaldeide viene prodotta dalla decomposizione delle specie idrocarburiche ossidate durante la decomposizione del KHP, ed è quindi un ottimo marcatore per monitorare la quantità di idrocarburi in questa fase di pre-ignizione (si noti in figura 1.8 che  $H_2CO$  e UHC hanno un andamento simile) in quanto è possibile renderla luminescente nei motori ottici. Durante questa fase viene prodotto  $H_2O_2$  relativamente stabile, specie che caratterizza la seconda fase di ignizione, grazie alla combinazione di radicali idroperossilici ( $HO_2$ ) o alla interazione degli stessi con molecole di formaldeide. Nelle temperature che caratterizzano il regime NTC avvengono sia le reazioni di produzione che quelle di decomposizione dell'  $H_2O_2$ , tuttavia quelle di produzione avvengono ad una velocità maggiore accumulandone una certa quantità. In questa fase, la modesta quantità di radicali OH disponibile prosegue gradualmente l'opera di ossidazione degli UHC con conseguente innalzamento della temperatura. Oltre la temperatura di 1000 K la reazione di produzione di  $H_2O_2$  diventa sfavorita ed aumenta invece la velocità della reazione di decomposizione, la quale mette a disposizione molti radicali OH accelerando vigorosamente le reazioni di ossidazioni ed il rilascio del calore, segno dell'inizio della seconda e ultima fase di ignizione, nella quale viene rilasciata la maggior parte dell'energia del combustibile. Il monossido di carbonio viene prodotto sin dall'inizio della prima ignizione, ma la maggior parte viene prodotto durante la prima parte della seconda ignizione, soprattutto per via delle reazioni di ossidazione e decomposizione del radicale formile ( $HCO$ ). Nella parte finale della seconda ignizione, in seguito all'esaurimento degli UHC ed alla grande produzione di radicali OH, si verifica una veloce ossidazione del  $CO$  ed una graduale riduzione dei radicali OH, eventi che segnano la fine della seconda fase di ignizione.

In conclusione, a differenza del motore Diesel tradizionale nel quale si potevano notare 3 fasi principali di rilascio del calore, nei motori LTC a causa di maggior diluizione, maggior tempo disponibile per la miscelazione e minor temperatura media dei gas contenuti nel cilindro, il rilascio del calore si compone di quattro fasi diverse e ben distinte: prima pre-ignizione, prima ignizione, seconda pre-ignizione e seconda ignizione (messe in evidenza in figura 1.7). Nei motori LTC le reazioni di ossidazione a bassa temperatura avvengono molto più lentamente, rendendo il fenomeno della *two stage ignition* particolarmente visibile.



## Capitolo 2

# Modalità di combustione HCCI e PCCI

In questo capitolo vengono trattate nello specifico le combustioni HCCI e PCCI, le combustioni LTC più studiate e sperimentate. Lavori di ricerca sono stati condotti in ogni parte del mondo su questi argomenti, e al giorno d'oggi sono disponibili innumerevoli articoli accademici che riguardano l'uso, le strategie di controllo e di miglioramento di queste tecnologie. In questo capitolo ci si fermerà ad una analisi della logica di funzionamento e degli aspetti operativi fondamentali, mentre nei successivi si riporteranno i risultati ottenuti.

### 2.1 Combustione HCCI

#### 2.1.1 Descrizione ed obiettivi

La combustione HCCI, acronimo di *Homogeneous Charge Compression Ignition*, è una condizione operativa di nuova concezione, che prende alcuni aspetti della combustione SI ed altri della combustione CI.

Come suggerisce il nome, consiste nell'accensione per compressione di una miscela omogenea di combustibile e comburente. L'obiettivo è quello di ottenere una miscela omogenea, globalmente magra, nella quale non siano presenti zone ad alto dosaggio di combustibile e che possa bruciare totalmente in fase premiscelata. Per ottenere questo risultato combustibile e comburente vengono miscelati esternamente al cilindro, la miscela ottenuta viene successivamente compressa e portata ad autoaccensione. Nell'ipotesi che a fine compressione la miscela sia a temperatura uniforme (che implica pareti del cilindro adiabatiche) ed omogenea dal punto di vista del rapporto di equivalenza, l'autoaccensione dovrebbe verificarsi simultaneamente in ogni punto portando ad un rilascio di calore istantaneo, completando la combustione in un tempo molto ridotto.

Questo esatto comportamento non è chiaramente ottenibile nella realtà, in quanto non è possibile eliminare gli scambi di calore verso l'esterno e non è nemmeno possibile raggiungere un perfetto miscelamento della carica. Si avranno quindi delle

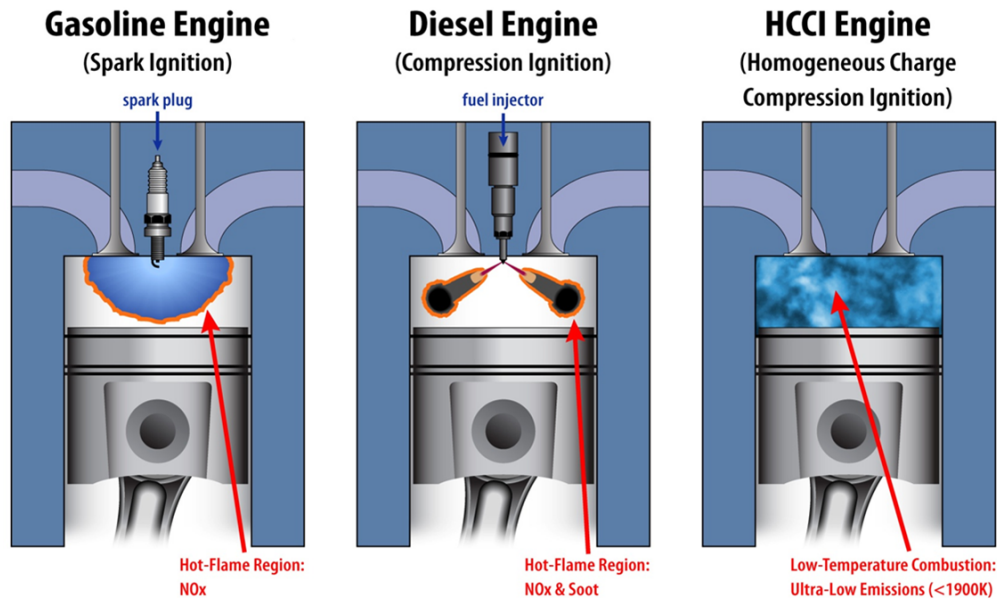


Figura 2.1: Combustione nei Motori tradizionali e nel Motore HCCI

zone più e meno calde e delle zone più e meno ricche di combustibile che porteranno a diversi ritardi d'accensione. In questo caso la combustione partirà da uno o più punti localizzati nel dominio, innalzando pressione e temperatura e velocizzando le reazioni di ossidazione del resto della carica, portando quindi anche in questo caso ad un rilascio di calore molto intenso in breve tempo. La disomogeneità dei campi di temperatura e di ricchezza rende molto difficile la previsione esatta del momento e del punto di autoaccensione, rendendo molto critico il controllo della combustione HCCI.

Esistono diverse possibilità per la preparazione della carica, ad esempio utilizzando dispositivi esterni che si occupano di riscaldare e miscelare combustibile e comburente al fine di ottenere un ottimo livello di omogeneità, un'altra via consiste nella "Port Injection" e quindi nell'iniezione diretta di combustibile all'interno del condotto di aspirazione. Con questa metodologia la capacità termica della massa aspirata si farà carico del calore latente necessario all'evaporazione del combustibile, la turbolenza ed i fenomeni di diffusione di massa saranno invece autori del livello di miscelamento raggiunto a fine compressione.

È facile intuire come nella combustione HCCI, che non può essere controllata dall'esterno come avviene nei motori SI (accensione della candela) e CI (immissione di combustibile), giochi un ruolo fondamentale la cinetica chimica, la quale caratterizza il momento di accensione, strettamente legato alle reazioni di ossidazione che si verificano a bassa temperatura.

I fattori che influenzano la combustione sono di conseguenza:

- Proprietà del combustibile
- Rapporto di equivalenza locale
- Grado di ricircolo dei gas combusti
- Rapporto di compressione
- Pressione e temperatura della miscela aspirata
- Temperatura delle pareti e scambio termico

Ognuno dei precedenti aspetti ha un'influenza più o meno forte sui processi associati alla cinetica chimica, il che rende l'idea di quanto siano complicati la compressione ed il controllo del fenomeno.

### 2.1.2 Rilascio del calore

Nel motore HCCI si manifesta in maniera estremamente riconoscibile il fenomeno della *two stage ignition*. In figura 2.2 vengono riportate le curve di rilascio del calore sperimentali di un motore HCCI operante con n-Eptano:

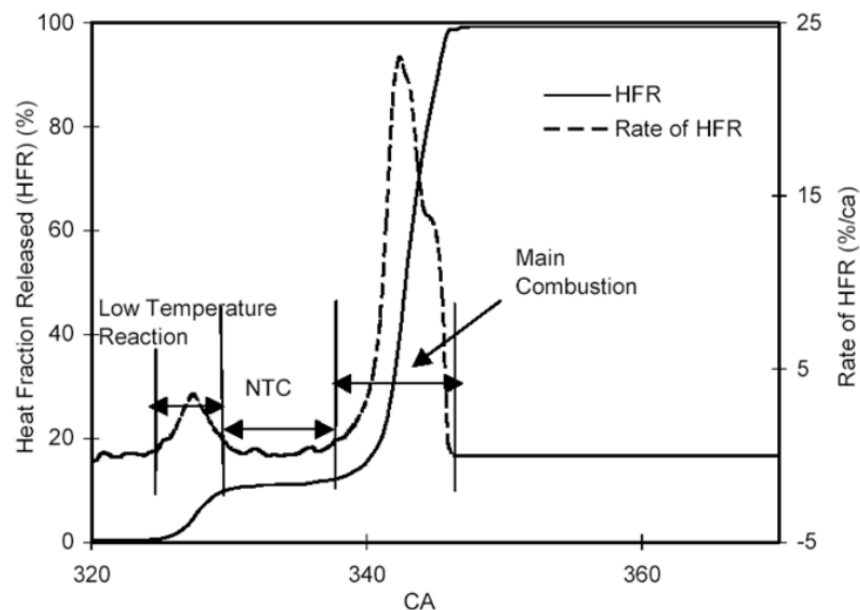


Figura 2.2: Rilascio del calore istantaneo in un motore HCCI che utilizza n-Eptano

La curva continua rappresenta il valore cumulato del calore rilasciato, la curva tratteggiata rappresenta invece il calore istantaneo, entrambe espresse come valori percentuali del calore totale rilasciato durante il processo. Nel caso di combustione

HCCI, il calore istantaneo segue le stesse fasi descritte al paragrafo 1.4.2 per la generica combustione LTC. È importante notare che nella combustione HCCI la maggior parte del calore viene rilasciata nella seconda fase di ignizione, in misura dipendente da questioni di cinetica chimica come spiegato nel paragrafo 1.4.1, e quindi di difficile previsione. Per tale tipo di previsione ci si deve affidare alla simulazione numerica di questo tipo di combustione, che verrà trattata nei seguenti capitoli.

### 2.1.3 Produzione di inquinanti

Come conseguenza del premiscelamento, la combustione si sviluppa a bassa temperatura ed in una miscela ben diluita, quindi senza il pericolo di formazione di particolato. Inoltre, a causa dei bassi rapporti di equivalenza, durante il completamento del processo di combustione le temperature medie delle masse che reagiscono sono nettamente più basse di quelle che si hanno localmente nel caso di fiamma diffusiva, quindi viene evitato anche il pericolo di produrre ossidi di azoto. Tuttavia, gli idrocarburi incombusti ed il monossido di carbonio formati non vengono ossidati alla stessa velocità di reazione tipica dei motori tradizionali, a causa delle inferiori temperature che hanno l'effetto di inibire la cinetica chimica, comportando solitamente una maggiore concentrazione di prodotti di combustione incompleta nei gas di scarico. Tali emissioni inquinanti possono però essere efficacemente ridotte entro i limiti fissati dalle normative antinquinamento, operando un post-trattamento in un convertitore catalitico ossidante.

### 2.1.4 Vantaggi e problematiche

I vantaggi della combustione HCCI si possono riassumere brevemente in due punti, e coincidono con gli obiettivi che si vuole ottenere adoperando la combustione LTC:

- Maggiore efficienza rispetto al motore SI
- Riduzione dell'emissione di particolato e  $NO_x$  tramite strategie *in-cylinder*

L'efficienza di combustione ottenibile con un motore HCCI è, per diversi motivi, superiore a quella di un motore SI tradizionale. Come principale motivazione si può indicare il maggior rapporto di compressione adottabile, in quanto questo tipo di motore non soffre della limitazione dovuta al fenomeno del battito in testa. Nel motore SI infatti, l'autoaccensione del combustibile è qualcosa di non voluto che andrebbe ad interferire con l'accensione comandata dalla candela. Nel motore HCCI invece l'autoaccensione è ricercata e controllata, utilizzando poi alti gradi di diluizione diventa possibile rallentare a sufficienza la cinetica chimica ed evitare quindi un'insorgenza troppo anticipata del fenomeno, rendendo possibile adottare rapporti di compressione fino ad un valore circa pari a 16. La seconda motivazione,

ma non in ordine di importanza, che può spiegare la maggior efficienza rispetto ad un motore SI è la possibilità di funzionamento ai carichi parziali aspirando sempre la stessa quantità di aria. Come spiegato in precedenza, nel motore SI invece è necessario ridurre il carico riducendo oltre alla massa di combustibile iniettata anche la massa di aria aspirata, al fine di mantenere costante il rapporto di equivalenza globale. Di conseguenza il motore HCCI non viene penalizzato da un più alto lavoro del ciclo di pompaggio ai carichi parziali, in quanto questo rimane sempre minimo. Un ulteriore aspetto che rende alta l'efficienza di combustione di questo motore è la modalità in cui il calore viene rilasciato e la conseguente forma assunta dal ciclo termodinamico. Una combustione intensa e breve come la HCCI, visibile chiaramente in figura 2.3 nella fila superiore di diapositive, porta ad un forte innalzamento della pressione in maniera quasi istantanea, concettualmente simile a quella del ciclo otto ideale (combustione adiabatica a volume costante), di conseguenza il ciclo HCCI reale ha una forma simile a quella del ciclo Otto ideale ed un valore di efficienza paragonabile.

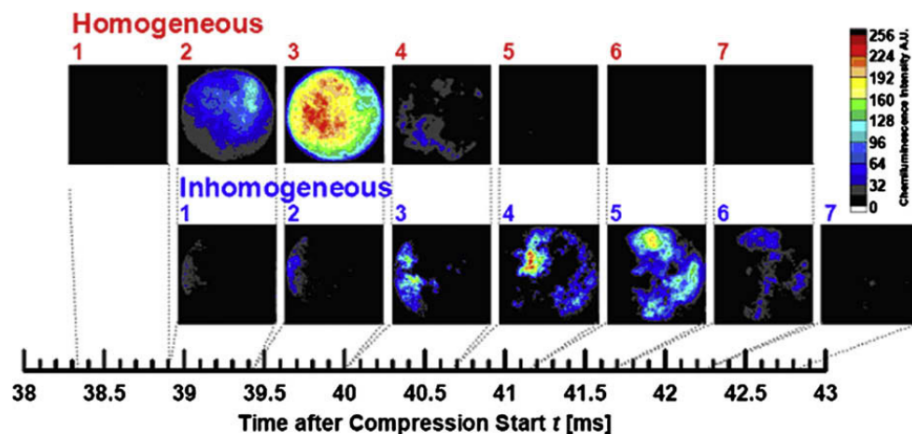


Figura 2.3: Visualizzazione della chemiluminescenza associata alla combustione di una miscela omogenea e di una miscela con un certo grado di disomogeneità

Un confronto fra le quantità di inquinanti prodotte dai motori tradizionali e quelle prodotte da un motore HCCI indicherebbe come assoluto vincitore quest'ultimo, in quanto non solo mostra una produzione minima complessiva, ma riduce fino quasi ad azzerare proprio la produzione di quegli inquinanti più critici da trattare, e quindi proprio gli ossidi di azoto  $NO_x$ , che andrebbero trattati con dispositivi SCR con iniezione di urea (nei motori per mezzi pesanti) ed il particolato, che dovrebbe essere catturato e distrutto con filtri anti-particolato (FAP).

Gli svantaggi associati all'utilizzo dei motori HCCI come propulsori terrestri sono:

- Difficoltà di controllo dell'esatto momento di accensione

- Problemi di rumorosità dovuti all'eccessiva rapidità della combustione
- Problemi strutturali per via dei forti gradienti di pressione, soprattutto agli alti carichi
- Elevata produzione di UHC e CO ai bassi carichi dovuta ad eccessiva diluizione
- Campo operativo limitato inferiormente da mancata accensione e superiormente da gradienti di pressione troppo elevati
- Difficoltà di avviamento a freddo per eccessiva dispersione termica
- Difficoltà di gestione dei transitori
- Bassa potenza specifica per l'utilizzo di alti gradi di ricircolo gas combusti
- Rischio di detonazioni pericolose

È facile concludere che, nonostante gli innegabili vantaggi forniti, la tecnologia HCCI sia ancora immatura o che alcune di queste problematiche siano di difficile soluzione. Il mondo della ricerca sta continuando il lavoro di studio e miglioramento di questo tipo di combustione, lavoro che sta portando anche all'apparizione di diverse tipologie di combustione che possono essere considerate parenti di quest'ultima, ognuna con i suoi punti di forza ed i suoi svantaggi.

## 2.2 Combustione PCCI

### 2.2.1 Descrizione ed obiettivi

La combustione PCCI, acronimo di *Premixed Charge Compression Ignition*, si propone di risolvere alcune di quelle problematiche relative alla combustione HCCI che ne rendono difficile l'impiego sui motori per autotrazione. L'obiettivo principale è quello di ridurre l'imprevedibilità del processo che causa problemi nel controllo, ed in secondo luogo contenere il picco del tasso di rilascio del calore, tipicamente molto alto nei motore HCCI, riducendo quindi la rumorosità ed il rischio di rottura. Per raggiungerlo si utilizza una carica premiscelata ma non uniforme dal punto di vista del rapporto di equivalenza. Così facendo la miscela presenterà punto per punto diversi valori del ritardo d'accensione, la combustione generata avrà quindi una durata maggiore ed il rilascio del calore sarà più graduale, così come l'innalzamento della pressione nel cilindro. In figura 2.3, nella fila inferiore di diapositive, si può apprezzare come una miscela non perfettamente uniforme porti ad avere una combustione più duratura e quindi meno intensa.

Per ottenere questo tipo di comportamento, il miscelamento fra combustibile e comburente deve avvenire prima dell'inizio della combustione ma con anticipo ridotto rispetto al caso HCCI. La condizione importante che si deve comunque verificare è che non si inneschi la combustione quando ancora si sta immettendo combustibile, altrimenti si verrebbero a creare fiamme di tipo diffusivo attorno alle goccioline di liquido non ancora evaporate, portando ad alte temperature, produzione di particolato ed ossidi di azoto, e vanificando quindi l'obiettivo principale delle combustioni LTC. Una variante della combustione PCCI è la PPCI, acronimo di *Partially Premixed Compression Ignition*, che prevede un anticipo d'iniezione inferiore e quindi l'utilizzo di una carica solo parzialmente premiscelata, con una certa frazione di combustibile che brucia con fiamma diffusiva. Il confine fra le due risulta essere molto sottile, in quanto una combustione PCCI diventa inevitabilmente PPCI al ridursi dell'anticipo di iniezione, questo succede quando sono ancora presenti alcune goccioline di liquido al momento di autoaccensione della carica premiscelata. Quindi in base al grado di premiscelamento ottenuto sarebbe più corretto parlare di una o dell'altra tipologia, rendendo particolarmente impegnativa la classificazione considerando che a priori non è facile valutare il valore di anticipo d'iniezione che sta a cavallo fra le due. L'iniezione di combustibile nei motori PCCI e PPCI segue una delle seguenti strade: *Early Injection* o *Late Injection*.

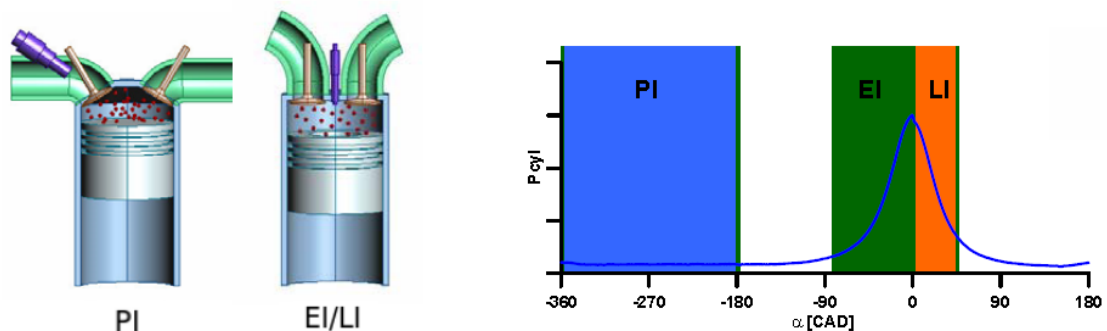


Figura 2.4: Confronto fra *Port Injection*(HCCI), *Early Injection* e *Late Injection* (PCCI)

A differenza del motore HCCI che prevedeva che il miscelamento fosse gestito esternamente con dispositivi appositi oppure con una *Port Injection*, queste due tipologie di iniezione appena introdotte prevedono l'immissione di combustibile direttamente all'interno del cilindro. Come è possibile notare in figura 2.4, la caratteristica che differenzia EI e LI è il momento in cui avviene l'iniezione di combustibile. Indicativamente si può parlare di *Early Injection* quando l'iniezione di combustibile avviene fra -100 CA ed il TDC e di *Late Injection* quando avviene fra il TDC e +40 CA circa. Nel caso di Late Injection è più corretto parlare di

combustione PPCI, in quanto molto facilmente l'autoaccensione avverrà quando una frazione consistente di combustibile si trova ancora allo stato liquido. L'anticipo con cui si inietta il combustibile viene scelto in base al tipo di stratificazione che si vuole ottenere. Un anticipo contenuto potrebbe portare alla formazione di una miscela molto stratificata, con alcune zone particolarmente ricche le quali favorirebbero l'autoaccensione. Viceversa un anticipo grande porterebbe alla formazione di una miscela più uniforme, di conseguenza l'autoaccensione potrebbe avvenire simultaneamente in più punti del dominio, inoltre una più alta concentrazione di ossigeno all'interno della miscela potrebbe far sì che la durata della combustione si riduca. Ragionando agli estremi, con un anticipo eccessivamente grande la miscela ottenuta sarebbe molto uniforme ed il comportamento sarebbe analogo a quello del motore HCCI, utilizzando invece un anticipo eccessivamente piccolo, non si darebbe il tempo necessario all'evaporazione del combustibile e si otterrebbe una combustione simile a quella del motore Diesel. È facile capire come la combustione PCCI si posizioni a metà fra le altre tipologie HCCI e Diesel, cercando di ottenere il miglior compromesso in termini di produzione di inquinanti, versatilità ed affidabilità.

Le condizioni di pressione e temperatura interne al cilindro al momento dell'iniezione, unite ad un opportuno grado di diluizione, devono essere tali da rallentare a sufficienza le reazioni di ossidazione a bassa temperatura e far sì che il combustibile iniettato abbia il tempo di evaporare e diffondere nella camera di combustione. È importante però che la miscela venuta a formare sia sufficientemente reattiva per non incappare nel rischio di mancata accensione.

Una differenza fondamentale fra il motore PCCI ed il motore HCCI consiste nel ruolo ricoperto dalle zone ad alta ricchezza della miscela, le quali nel secondo costituiscono un effetto indesiderato dovuto ad un miscelamento imperfetto, rendendo il processo imprevedibile e potendo anticipare anche di molto il momento di autoaccensione rispetto al caso di miscela perfettamente uniforme.

La posizione e l'istante di autoaccensione è invece qualcosa di più prevedibile nel motore PCCI, in quanto conseguenza solo di quanto avviene nella fase di iniezione, e non delle fasi di preparazione, aspirazione e compressione della miscela come nel caso HCCI, si riduce quindi l'incertezza associata al processo. Utilizzando di proposito una miscela stratificata si è consci della presenza di zone ricche, dalle quali la combustione partirà e si diffonderà al resto della carica, è necessario quindi studiare le interazioni fra la geometria interna, la turbolenza e lo spray di combustibile per comprendere l'evoluzione della distribuzione di temperatura e di ricchezza per poter prevedere e controllare il fenomeno.



## 2.2.2 Rilascio del calore

Ci si aspetta quindi che utilizzando una miscela non perfettamente uniforme e con un alto grado di diluizione, la combustione risultante sia più lenta e con un picco di rilascio del calore più contenuto. La legge di rilascio del calore di questi motori non è descrivibile in forma generica, in quanto strettamente dipendente dal tipo di carica che si viene a formare, essa sarà quindi diversa caso per caso e dipenderà da SOI, durata dell'iniezione, geometrie, condizioni termofisiche ed altri fattori. In ogni modo, anche in questo caso sarà visibile il comportamento tipico dei combustibili *diesel-like* nelle combustioni LTC con i caratteristici due picchi di rilascio del calore relativi alla prima ed alla seconda fase di ignizione. In figura 2.5 sono visibili i diversi profili di calore istantaneo apparente e pressione ottenuti in un motore PCCI utilizzando una *Early Injection* (a sinistra) ed una *Late Injection* (a destra) in condizioni di basso carico e con ricircolo di gas combusti.

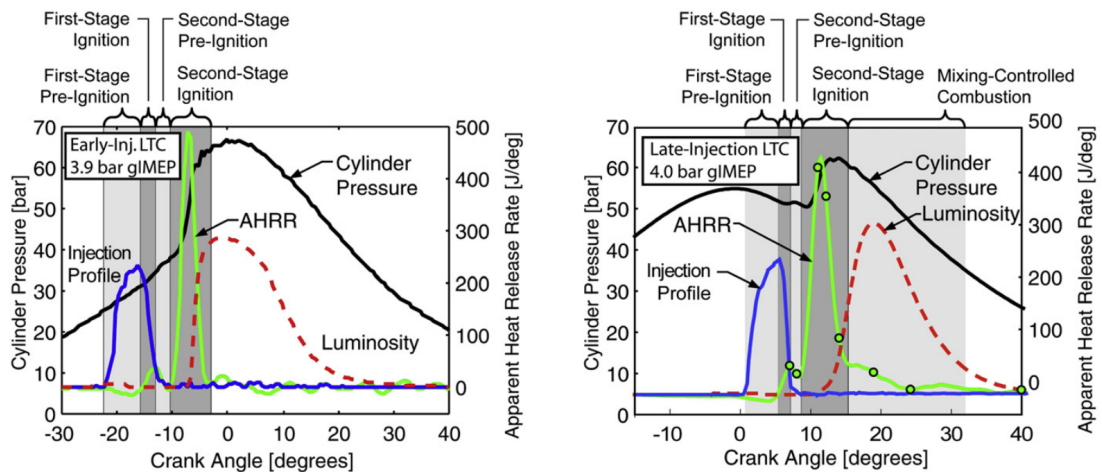


Figura 2.5: Profili di pressione e di rilascio del calore nel caso di *Early Injection* e *Late Injection*

Nel caso di *Early Injection* l'iniezione di combustibile comincia a -22 CA ed ha una durata di circa 10 CA. Come si può notare dal grafico, durante questa fase la pressione è molto più bassa rispetto al caso Diesel, di conseguenza la massa di gas contenuta nel cilindro sarà meno densa permettendo una maggior penetrazione dello spray. In queste condizioni non è raro che lo spray penetri fino ad impattare sulle pareti del pistone o del cilindro.

La curva di rilascio del calore si compone delle stesse quattro fasi descritte nel paragrafo 1.4.2 riguardo la *Two Stage Ignition*. Invece nel caso di *Late Injection* riportato in figura 2.5 l'iniezione di combustibile avviene ad una pressione più alta, attorno ai 50 bar, di conseguenza anche la temperatura è più alta, riducendo fino a quasi eliminare la presenza della zona NTC, che invece è ben visibile in caso

di EI. La curva di rilascio del calore relativo alla LI mostra una fase aggiuntiva rispetto a quella ottenuta con EI, rappresentata in figura 2.5 dall'ultima fascia grigio chiaro indicata come "Mixing-Controlled Combustion". Per via del minor tempo che intercorre fra la fine della fase di iniezione e l'inizio del rilascio del calore non si riesce ad ottenere una totale evaporazione del combustibile, la combustione generata viene descritta più correttamente con l'acronimo PPCI; la frazione di combustibile che durante la combustione si presenta in forma liquida brucerà con fiamma diffusiva, rilasciando più lentamente il calore e modificando la parte finale della curva AHRR. Importante notare che il picco di rilascio di calore istantaneo ottenuto in questi motori è mediamente tre volte quello dei motori Diesel tradizionali, causando in genere alti livelli di rumorosità (quasi  $500 J/deg$  contro i  $160 J/deg$  della combustione Diesel analizzata al paragrafo 1.3) [11].

### 2.2.3 Produzione di inquinanti

La carica presente nel cilindro al momento dell'autoaccensione è molto diversa da quella che si ha nel caso di combustione HCCI. Il tempo disponibile per l'evaporazione ed il miscelamento del combustibile è significativamente inferiore, questo fa sì che il combustibile diffonda meno portando ad avere una grande diversità di rapporti di equivalenza all'interno della massa di gas, passando da zone ricche ( $\phi > 2$ ) a zone molto magre ( $\phi < 0.5$ ) o addirittura costituite da sola aria ( $\phi = 0$ ). Nel caso invece in cui una frazione del combustibile iniettato non riesca ad evaporare e premiscelarsi con il comburente in tempo utile, al momento dell'autoaccensione la fiamma premiscelata può arrivare in contatto con queste zone liquide e generare una fiamma diffusiva con tutto quello che ne consegue. Tutto questo porta a limitare la validità di quanto affermato nel paragrafo 1.4.1 riguardo la formazione di inquinanti nelle combustioni LTC, in quanto con una miscela di questo tipo indubbiamente crea le condizioni per la produzione di piccole quantità di particolato nelle zone ad alta ricchezza, e di ossidi di azoto nelle zone ad alta temperatura con ambiente ossidante, oltre ai soliti UHC che possono generarsi nelle zone più fredde e magre del cilindro. Il risultato finale è una combustione leggermente più "sporca" della combustione HCCI, ma sicuramente meno della combustione Diesel tradizionale, in quanto una frazione considerevole della carica assume un rapporto di equivalenza tale da bruciare nel modo migliore.

### 2.2.4 Vantaggi e problematiche

La combustione PPCI costituisce attualmente la alternativa più concreta alle combustioni tradizionali. Essa ha il potenziale per ottenere i traguardi prefissati (efficienza e ridotta produzione di inquinanti) senza mostrare tante di quelle problematiche riscontrate nella combustione HCCI. Passiamo quindi all'analisi dei pro e

dei contro di questa soluzione.

I vantaggi messi in mostra dalla combustione PCCI sono gli stessi della combustione HCCI, e quindi:

- Maggiore efficienza rispetto al motore SI
- Ridotta produzione di ossidi di azoto e particolato

Di seguito si confrontano alcune caratteristiche della combustione PCCI, prendendo come riferimento la combustione HCCI:

- Preparazione della carica meno complessa
- Migliore controllabilità
- Rilascio del calore più graduale
- Ad anticipi di iniezione molto ridotti può generare fiamme diffusive
- Maggiore produzione di inquinanti
- Spray impatta sulle pareti, accumulando combustibile liquido che evapora lentamente
- Maggiori interazioni fra spray, turbolenza e geometria della camera di combustione

L'adozione dell'iniezione diretta facilita il lavoro di preparazione della carica, che diversamente dovrebbe essere preparata da dispositivi esterni, oppure prevedendo l'iniezione di combustibile nel condotto di aspirazione con un iniettore dedicato. Un altro aspetto molto importante è che l'immissione del combustibile avviene a compressione inoltrata, a differenza della combustione HCCI che prevede la presenza della carica già all'inizio della fase di compressione, di conseguenza la miscela accenderà con un certo ritardo dopo il SOI riducendo il rischio di accensioni troppo anticipate. Il fatto che la preparazione della carica premiscelata avvenga in un tempo contenuto fra il SOI ed il SOC, fa sì che siano molto importanti gli effetti combinati di spray, turbolenza e geometria della camera di combustione, ed in particolare della tazza del pistone.

### **2.2.5 Caratteristiche dei motori PCCI**

Non esiste ancora uno standard di riferimento per quanto riguarda le caratteristiche dei motori PCCI e delle strategie che questi adattano. L'argomento è molto complesso, le variabili sono molte, non esiste quindi una base consolidata di conoscenza sulla quale si siano definite delle linee guida universali per la progettazioni

dei motori PCCI. Esistono tuttavia molte strade già esplorate in diversi lavori di ricerca, che possono costituire una base di partenza per lo sviluppo di un progetto di questo tipo di motore.

### Ottimizzazione dello spray e della geometria della camera di combustione

Come descritto nella sezione precedente, nel motore PCCI la geometria interna e l'evoluzione dello spray hanno un effetto diretto sul miscelamento del combustibile. I sistemi di iniezione "common-rail" comunemente utilizzati nei motori Diesel non facilitano l'operazione di miscelamento del combustibile nei motori PCCI. Le alte pressioni di iniezione, utilizzate nel motore Diesel per facilitare l'atomizzazione, generano uno spray che percorre la camera di combustione ad alta velocità. Questo, nelle condizioni operative del motore PCCI caratterizzato da grandi anticipi di iniezione e quindi da bassa densità dei gas nel cilindro, causa una penetrazione elevata dello spray, che nella maggior parte dei casi porta le particelle liquide ad impattare sulle pareti, un fenomeno chiamato "impingement". In base all'angolo di inclinazione dello spray ed al SOI, l'impatto può avvenire sul pistone o sul cilindro (si veda figura 2.6).

Questo fenomeno può portare ad un eccessivo accumulo di combustibile liquido a ridosso delle pareti rallentando l'evaporazione, con importanti conseguenze sulla miscelazione della carica e sulla produzione di inquinanti. Sono stati studiati sistemi di iniezione dedicati ai motori PCCI, i quali adottano pressioni di iniezione inferiori per limitare il fenomeno appena descritto. Adottare tali sistemi precluderebbe la possibilità di sviluppare motori con funzionamento duale, PCCI ai carichi intermedi e Diesel tradizionale ai carichi bassi e alti. Come descritto da Hyung-min Kim et al. [12], è possibile utilizzare i sistemi di iniezione *common-rail* in maniera efficiente anche nei motori PCCI, calibrando con cura l'inclinazione dello spray ed il punto dove avviene l'impatto, comunemente chiamato "target".

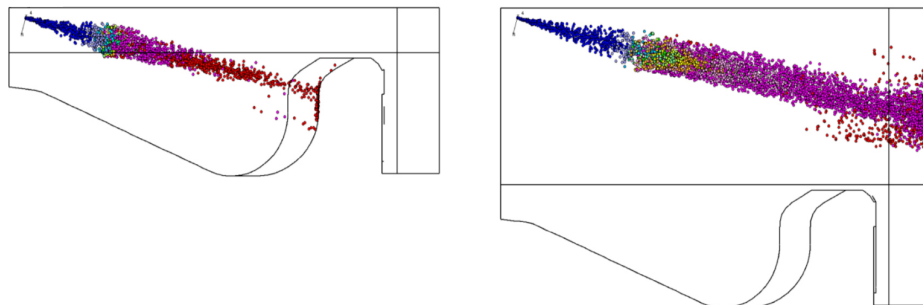


Figura 2.6: Esempi di impingement sul pistone (a sinistra) e sul cilindro (a destra)

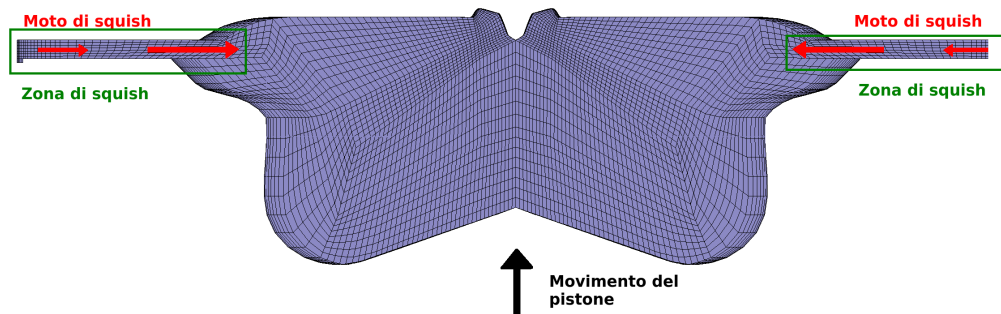


Figura 2.7: Sezione del volume interno di un motore

L'esperimento condotto da Hyung-min Kim et al. [12] mette in evidenza come il punto di impatto sia di fondamentale importanza per il miscelamento del combustibile. Conducendo diverse prove, con diversi angoli di apertura dello spray e diversi valori di SOI, è stato dimostrato che per ottenere una migliore miscelazione lo spray deve essere diretto verso il bordo superiore della tazza o verso il volume di squish. Le prove condotte da Sangsuk Lee et al. [13] forniscono delle indicazioni importanti sull'andamento delle emissioni al variare del *target*. Viene dimostrato che acquisendo come *target* il bordo superiore della tazza o il volume di squish è possibile minimizzare le emissioni di particolato. Viene anche messo in luce che, fra le due possibilità, utilizzare come *target* il bordo superiore della tazza assicura emissioni di monossido di carbonio inferiori. Il controllo del punto di *target* non è banale, in quanto dipende da parametri geometrici come l'apertura dei fori dell'iniettore, e dalle condizioni operative, e quindi densità dei gas e valore del SOI. Hyung-min Kim et al. [12] ha condotto alcuni esperimenti con l'obiettivo di limitare il fenomeno di *impingement*. La strategia proposta è quella di operare iniezioni multiple di durata limitata, tale da limitare la penetrazione nelle singole iniezioni. Viene inoltre messo in evidenza che, nelle iniezioni più ritardate nel tempo, si può adottare una durata di iniezione maggiore senza arrivare ad avere *impingement*.

Oltre allo spray, anche la geometria interna influenza sensibilmente il processo di combustione. La geometria della zona dove impatta lo spray ha una grande influenza su come il combustibile viene distribuito nella camera di combustione. Cao et al. [14] dimostrano che una tazza a parete laterale verticale garantisce le minori emissioni combinate di inquinanti. In figura 2.7 viene riportata la sezione di un motore progettato con questo accorgimento, e quindi con la parete della tazza quasi verticale.

### **Interazione fra Spray e i moti di swirl e squish**

Un altro ruolo importante nei motori PCCI, viene svolto dai moti di squish e swirl. Il moto di swirl consiste nella rotazione dei gas contenuti nel cilindro in direzione tangenziale. Viene generato al momento dell'introduzione della carica, utilizzando un condotto di aspirazione di forma particolare, e viene esaltato durante la fase di compressione per la conservazione del momento angolare. Lo swirl consente di incrementare il livello di turbolenza del campo di moto, ampliando gli effetti di scambio di massa. Il moto di squish invece, viene generato dal movimento del pistone, al variare del volume della zona messa in evidenza in figura 2.7. [1] In particolare, l'intensità del moto di squish dipende dalla forma del pistone, infatti quanto più è alto il bordo superiore della tazza, quanto più piccola sarà l'altezza della zona di squish al TDC, provocando la quasi totale evacuazione dei gas ivi presenti. Il moto si innesca quando il pistone, durante la sua corsa di compressione, si avvicina al punto morto superiore, provocando una grande variazione del volume della zona di squish, più intensa nella fase finale della corsa. La velocità assunta dai gas evacuati da questa zona è tale da generare una forte interazione con lo spray e da incrementare l'azione di miscelamento del combustibile. L'influenza dei moti di swirl e squish è stata studiata da Yao et al. [4] al fine di ottimizzare il miscelamento della carica e la riduzione delle emissioni. Nei capitoli successivi si analizzeranno le interazioni dello spray con i moti di swirl e squish, e si cercherà di capirne gli effetti.

## Capitolo 3

# La simulazione numerica della combustione nei MCI

I fenomeni che controllano il funzionamento dei motori a combustione interna sono molti e molto complessi, così anche la loro comprensione e modellazione. Per riuscire a modellare correttamente il funzionamento di un motore bisogna far fronte a diversi aspetti, tra i quali: flusso multi-specie, multifase, comprimibile, turbolento, reagente, associato a scambio di calore e con geometria tempo-variante del dominio. Ognuno degli aspetti introdotti deve essere trattato opportunamente, al fine di creare un modello che restituisca risultati affidabili.

La complessità globale è tale da limitare il livello di conoscenza raggiungibile facendo uso del solo intuito e della sola conoscenza. Per poter studiare in maniera sempre più approfondita i fenomeni che occorrono all'interno dei MCI bisogna fare affidamento ad altre risorse, quindi a prove sperimentali o a strumenti informatici, in grado di fornire delle risposte alle nostre domande, là dove la nostra mente non è in grado di portarci.

La simulazione a computer del funzionamento dei motori tradizionali è qualcosa che viene affrontato ormai da molti anni; al giorno d'oggi si dispone di diversi strumenti informatici sufficientemente affidabili che riescono a replicarne il comportamento. L'avvento di HCCI e PCCI, ovvero di combustioni ad accensione controllata dalla cinetica chimica, ha portato a dover affrontare un nuovo problema. Per modellare correttamente questi fenomeni diventa fondamentale studiare e comprendere la chimica che controlla il processo, al fine di creare uno strumento che possa prevedere correttamente l'evoluzione delle specie chimiche, il fenomeno di autoaccensione ed il tasso di rilascio del calore, compito nel quale gli strumenti sviluppati per i motori tradizionali falliscono. Diventa necessario l'utilizzo di uno strumento che sia in grado di modellare un fenomeno multidimensionale, e che sulla base delle equazioni di conservazione e del trasporto, della chimica e dello scambio termico riesca a replicare tutti quei fenomeni che avvengono nel mondo reale e fornire una "versione virtuale".

La fluidodinamica computazionale, più brevemente detta CFD (*Computational Fluid Dynamics*), è l'unico strumento in grado di rispondere a tutte le necessità di questo caso.

In questo capitolo si parlerà quindi della CFD e della simulazione CFD dei motori a combustione interna.

### 3.1 La fluidodinamica computazionale

La fluidodinamica computazionale o CFD è l'analisi dei sistemi caratterizzati dal flusso dei fluidi, dallo scambio termico ed eventuali altri fenomeni, grazie all'uso dei computer e delle simulazioni numeriche [15].

Il principale obiettivo della CFD è quello di risolvere le equazioni di conservazione, e quindi le equazioni di Navier-Stokes.

La risoluzione per via analitica di queste equazioni è fattibile solamente in casi semplici, ad esempio quelli caratterizzati da flussi laminari e geometrie semplici (sfere, lastre piane), mentre le risoluzioni di casi reali, in cui compaiono di frequente flussi turbolenti ed altri fenomeni complessi, richiedono per forza un approccio numerico. Esistono quindi diversi metodi per risolvere le equazioni di Navier-Stokes, e poiché generalmente sono operazioni dall'elevato costo computazionale, si sono sviluppate metodologie dedicate a casi più o meno esigenti dal punto di vista dell'accuratezza e della dimensione fisica del fenomeno:

- Simulazione Numerica Diretta (DNS: Direct Numerical Simulation): è l'approccio concettualmente più semplice, che consiste nella discretizzazione dello spazio e del tempo con passi sufficientemente piccoli da poter captare anche i fenomeni su microscala. È l'approccio che restituisce i risultati più accurati ma ha un costo computazionale elevatissimo, tale da rendere essenziale l'utilizzo di supercomputer anche per la soluzione dei casi più semplici. Trova scarsa applicazione nella pratica.
- Equazioni mediate alla Reynolds (RANS: Reynolds Averaged Navier-Stokes): si basano sull'assunzione che si possa vedere il moto turbolento come se fosse caratterizzato da un moto medio e da una sua fluttuazione nel tempo. Le grandezze delle equazioni di partenza vengono mediate in un certo intervallo di tempo; così facendo i tempi di calcolo vengono notevolmente ridotti in quanto le scale del moto medio risultano essere notevolmente maggiori di quelle del moto turbolento (fenomeni su microscala). L'operazione di media provoca una perdita di informazione, richiedendo l'utilizzo di equazioni aggiuntive che descrivano parte di quello che non può essere descritto dal modello mediato. Queste equazioni devono poter descrivere il ruolo della turbolenza sul campo di moto e sul trasporto delle grandezze, che viene eliminato dall'operazione di media temporale operata dall'approccio RANS. È



l'approccio più utilizzato in quanto il meno esigente dal punto di vista di computazionale, è necessario però valutare caso per caso il livello di accuratezza necessario e quello ottenibile con questo tipo di approccio.

- Simulazioni LES (Large Eddy Simulation): prevedono la simulazione diretta delle scale turbolente più grandi, strettamente dipendenti dalla geometria in considerazione e caratterizzati da una forte influenza sul flusso medio, e modellare opportunamente le scale più piccole (Sub-grid Scale o scale di Kolmogorov), caratterizzate da un comportamento universale [15]. Per operare questa suddivisione si esegue una filtrazione spaziale, che elimina tutti i fenomeni instazionari con una dimensione caratteristica inferiore ad un valore prestabilito. Forniscono risultati più accurati delle RANS, il tempo richiesto per il calcolo è comunque molto elevato. Il loro utilizzo rimane quindi limitato a casi particolari, in cui l'esigenza di ottenere un risultato accurato giustifichi il fatto di affrontare un maggior sforzo computazionale.

In molti casi è prevista la risoluzione di altre equazioni oltre a quelle di Navier-Stokes ed alle equazioni del modello di turbolenza. Esse possono comprendere quelle relative alla concentrazione di diverse specie chimiche (flusso multicomponente), di reazioni chimiche (flussi reagenti) ed irraggiamento termico. In alcuni casi è prevista la modellazione di ulteriori fenomenologie, come nel caso dei flussi bifase (ad esempio gas / liquido) o nel caso di fluidi non Newtoniani.

Sono disponibili differenti tecniche di soluzione numeriche dei problemi CFD:

- Metodo alle differenze finite
- Metodo ai volumi finiti
- Metodo ad elementi finiti
- Metodo di Lattice-Boltzmann
- Metodo spettrale

Molti software utilizzati nell'ambito della CFD si basano sul metodo ai volumi finiti, sul quale ci soffermeremo brevemente più avanti. Uno studio CFD si compone essenzialmente di tre fasi: *Pre-Processing*, *Processing* e *Post-Processing*.

**Pre-Processing**, fase nella quale si definisce il dominio computazionale e si genera la griglia (di cui si parlerà al paragrafo 4.1.2), si selezionano i fenomeni fisico-chimici da modellare, si fornisce una descrizione delle proprietà dei fluidi e si specificano le condizioni al contorno delle regioni limite. Considerando che la soluzione raggiungerà, nella migliore delle ipotesi, lo stesso livello di accuratezza

che caratterizza la griglia stessa, è facile capire quanto la fase di generazione di quest'ultima sia fondamentale. La fase di *pre-processing* è di solito quella alla quale si deve dedicare maggior tempo ed attenzione.

**Processing**, fase dedicata alla discretizzazione spazio-temporale del problema, alla soluzione delle equazioni di Navier-Stokes e di tutte le equazioni dei fenomeni associati. Queste operazioni vengono svolte da un *solutore* appropriato, che opererà seguendo le condizioni iniziali e le impostazioni numeriche definite durante la fase di *pre-processing*.

**Post-Processing**, è la fase nella quale si passa allo studio ed all'elaborazione dei risultati ottenuti, con software di grafica 2D e 3D e software di calcolo.

La CFD è uno strumento molto potente, che permette di ampliare la conoscenza di un fenomeno laddove la mente umana o le prove sperimentali non riescono ad arrivare, per questioni tecniche o di costi. Uno dei più grandi vantaggi della CFD risiede infatti nella possibilità di studiare in maniera approfondita un problema senza la necessità di condurre costose e complesse indagini sperimentali. Un altro grande vantaggio è quello di riprodurre più o meno fedelmente i fenomeni reali che caratterizzano un processo, dando la possibilità di studiare con facilità quelle grandezze difficilmente misurabili nella realtà (temperatura, concentrazione di specie chimiche, ...). Uno studio CFD è ripetibile e non invasivo, ovvero non genera nessuna fonte di incertezza, al contrario delle apparecchiature di misura utilizzate nelle prove sperimentali.

La CFD si può rivelare però un'arma a doppio taglio nel caso si presti poca attenzione alla accuratezza delle impostazioni numeriche, alla validità dei modelli utilizzati, alla scelta delle condizioni al contorno e ad altri aspetti che possano rendere i risultati ottenuti totalmente privi di significato.

Per condurre con successo uno studio CFD è quindi importante procurarsi le risorse computazionali necessarie, i giusti strumenti software e le giuste competenze, ma soprattutto è fondamentale la capacità di analisi dell'affidabilità dei risultati ottenuti, al fine di non incappare in conclusioni errate.

### 3.1.1 Le equazioni della Fluidodinamica

Per la soluzione di un problema di Fluidodinamica ci si affida alle equazioni base della fisica. In particolare si ha a che fare con le equazioni di conservazione (di massa, quantità di moto ed energia) e con le condizioni ausiliarie (condizioni iniziali e condizioni al contorno). Le equazioni che governano il fenomeno rappresentano matematicamente i seguenti concetti

- La massa del fluido si conserva

- Il tasso di variazione della quantità di moto equivale alla somma delle forze agenti su una particella fluida
- Il tasso di variazione dell'energia è equivalente alla somma di calore e lavoro agenti sulla particella fluida, presi con i relativi segni

Importante sottolineare l'ipotesi base su cui si basa la fluidodinamica, ovvero quella di trattare la materia come se fosse un mezzo continuo, assumendo che le grandezze ed i tempi caratteristici del problema siano considerevolmente più grandi delle scale che descrivono la struttura discreta della materia [15].

I principali problemi a cui far fronte per caratterizzare un problema CFD sono:

- Derivazione in coordinate cartesiane del sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali che descrivono il flusso
- Equazioni di stato termodinamico
- Modello degli sforzi viscosi di Newton che porta alla definizione delle equazioni di Navier-Stokes
- Ottenimento delle equazioni del trasporto dalle equazioni di conservazione
- Forma dell'equazione del trasporto integrata in un intervallo di tempo finito ed all'interno di un volume finito
- Condizioni al contorno appropriate
- Condizioni ausiliare per la descrizione degli effetti viscosi associati al flusso
- Problemi nella definizione delle condizioni al contorno in condizioni di flusso ad alti numeri di Reynolds e di Mach

Veniamo ora alla descrizione di tali equazioni. Si introduce anzitutto il concetto di derivata materiale, che descrive il tasso di variazione di una generica grandezza intensiva  $\phi$  nel tempo all'interno di un volume di controllo  $V_m$  (fig. 3.1):

$$\frac{d}{dt} \int_{V_m(t)} \rho \phi(\mathbf{x}, t) dV = \frac{\partial}{\partial t} \int_{V_m(t)} \rho \phi dV + \oint_{\partial V_m} (\rho \phi \mathbf{U}) \cdot d\mathbf{S} \quad (3.1)$$

dove  $\partial V_m$  rappresenta la superficie esterna del volume di controllo,  $\mathbf{x}$  il vettore delle coordinate spaziali,  $t$  il tempo,  $dV$  un infinitesimo del volume di controllo,  $d\mathbf{S}$  un infinitesimo di superficie moltiplicato per il suo vettore normale.

L'equazione 3.1 indica che il tasso di variazione nel tempo della generica grandezza intensiva  $\phi$  è esprimibile come somma della variazione nel volume e della

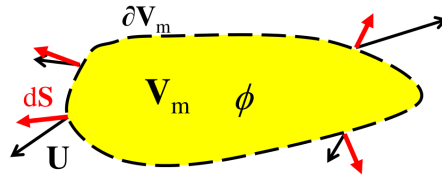


Figura 3.1: Esempio di un volume di controllo caratterizzato dalla grandezza intensiva  $\phi$

variazione conseguente al flusso convettivo al contorno del volume.

Si descrive poi la variazione della grandezza  $\phi$  come somma dei contributi di superficie e di volume, quindi:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{V_m(t)} \rho \phi dV + \oint_{\partial V_m(t)} (\rho \phi \mathbf{U}) \cdot d\mathbf{S} = \int_{V_m(t)} Q_V(\phi) dV + \oint_{\partial V_m(t)} Q_S(\phi) \cdot d\mathbf{S} \quad (3.2)$$

dove  $Q_V$  è il generico contributo specifico al volume, e  $Q_S$  il generico flusso areico, entrambi relativi alla grandezza  $\phi$ . La 3.2 può essere scritta anche in forma differenziale utilizzando il teorema di Gauss:

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \phi \mathbf{U}) = Q_V(\phi) + \nabla \cdot Q_S(\phi) \quad (3.3)$$

L'equazione 3.3 permette di caratterizzare la forma generale delle equazioni di conservazione delle grandezze fisiche di interesse.

Partendo da questa base, si introducono ora le equazioni utilizzate dai software CFD per la soluzione dei problemi di fluidodinamica.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = 0 \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h) = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \dot{W}_g + \dot{Q}_C + \dot{Q}_r \quad (3.6)$$

La 3.4 è l'equazione di conservazione della massa, la 3.5 è l'equazione di conservazione della quantità di moto, e la 3.6 è l'equazione di conservazione dell'energia,

nella forma entalpica. Nell'equazione 3.5 il termine  $\rho\mathbf{g}$  rappresenta il contributo dato dalla forza gravitazionale che agisce sul sistema,  $\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$  rappresenta invece il contributo dato dagli sforzi viscosi, in particolare  $\boldsymbol{\tau}$  è proprio il tensore degli sforzi viscosi generato dal comportamento viscoso del fluido e dal campo di moto. Utilizzando l'ipotesi di fluido Newtoniano, il tensore degli sforzi  $\boldsymbol{\tau}$  si può scrivere come segue:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\mathbf{S} - \frac{2}{3}\mu\delta\nabla \cdot \mathbf{U} \quad (3.7)$$

dove  $\mathbf{S}$  rappresenta il deviatore degli sforzi viscosi  $\frac{1}{2}(\nabla\mathbf{U} + \nabla\mathbf{U}^T)$  e  $\delta$  il tensore di Kronecker.

Nell'equazione 3.6 invece, il termine  $\frac{Dp}{Dt}$  rappresenta la derivata totale della pressione ed il contributo da essa data,  $q$  il flusso di calore netto per unità di volume,  $\dot{W}_g$  il contributo delle forze di volume (forza gravitazionale),  $\dot{Q}_C$  e  $\dot{Q}_r$  i contributi di reazioni chimiche ed irraggiamento, rispettivamente [16].

Nel caso si debba trattare un flusso multi-specie, diventa necessario risolvere l'equazione del trasporto per ognuna delle specie coinvolte:

$$\frac{\partial\rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}Y_i) = \nabla \cdot [\mu_{eff}\nabla Y_i] + \dot{Y}_i \quad (3.8)$$

dove  $Y_i$  è la frazione massica della specie i-esima,  $\mu_{eff}$  rappresenta la viscosità efficace,  $\dot{Y}_i$  è il termine sorgente.

Un codice CFD utilizzabile per la simulazione della combustione nei MCI con iniezione diretta, deve essere in grado di gestire un flusso multifase e quindi descrivere propriamente la fase liquida e la fase gas presenti nel dominio. In questi casi, oltre alle equazioni di conservazione base della fluidodinamica, si dovrà includere un'equazione apposita chiamata *Equazione dello spray*. Solo in seguito alla sua risoluzione sarà possibile valutare le interazioni fra la fase gas e la fase liquida. Dal punto di vista computazionale il problema viene affrontato aggiungendo dei termini alle equazioni di conservazione della fase gas, che spiegano il contributo dello spray sulla conservazione della massa, della quantità di moto e dell'energia. Per approfondimenti sull'equazione dello spray e sul calcolo dei termini contributivi da inserire nelle equazioni della fase gas si rimanda a testi specialistici ([3]). Le equazioni di conservazione relative alla fase gas, includendo i contributi dati dallo spray, diventano quindi:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{U}) = \dot{S}_\rho \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \dot{S}_M \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} h) = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \dot{W}_g + \dot{Q}_C + \dot{Q}_r + \dot{Q}_S \quad (3.11)$$

Dove  $\dot{S}_\rho$  è il termine sorgente di massa,  $\dot{S}_M$  il termine sorgente di momento e  $\dot{Q}_S$  il contributo termico dovuti allo spray. La soluzione di queste equazioni, insieme alle equazioni che descrivono altri fenomeni (reazioni chimiche, scambio termico, spray, ...), sarà affidata ad un codice che fornirà come risultato il valore delle grandezze in ogni cella del dominio e ad ogni istante discretizzato.

### 3.1.2 Il metodo ai volumi finiti

L'obiettivo del metodo ai volumi finiti è quello di trasformare un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali in un sistema di equazioni algebriche equivalente. Risolvendo questo sistema si ottiene un insieme di valori che costituiscono la soluzione del sistema originale di equazioni, in determinati istanti temporali ed in determinate posizioni nel dominio. Per ottenere il risultato indicato si deve *discretizzare* il problema, passando per le seguenti fasi:

- Discretizzazione del dominio
- Discretizzazione delle equazioni

La discretizzazione del dominio ha l'obiettivo di descrivere numericamente la regione interessata dal flusso, in particolare serve ad identificare la posizione dei punti nei quali verrà valutata la soluzione del sistema di equazioni differenziali. Il dominio viene quindi diviso in un numero finito di volumi di controllo, chiamati anche celle, che possono avere forme differenti (tetraedriche, poliedriche, ...). Per problemi tempo-varianti si deve dividere anche l'intervallo di tempo in un numero finito di valori discreti. L'operazione di discretizzazione del dominio genera quella che viene comunemente chiamata *griglia*, in inglese *mesh*, cioè l'insieme delle celle che costituiscono il dominio, di cui viene riportato un esempio in figura 3.2:

La generazione della griglia è uno dei primi problemi da affrontare quando si intraprende uno studio CFD, ed è solitamente un'operazione molto complessa.

Per quanto riguarda invece la discretizzazione delle equazioni solitamente ci si affida agli schemi numerici già presenti nei software CFD, che permettono all'utente di decidere quali adoperare. Per informazioni aggiuntive sul metodo dei volumi finiti, sulle metodologie di discretizzazione e relativa accuratezza si rimanda a testi specialistici ([15] [16] [17]).

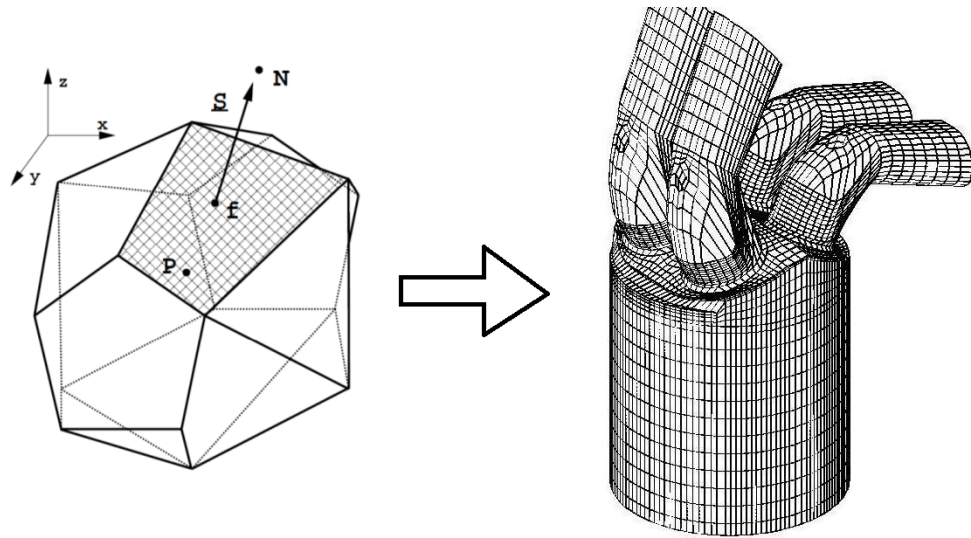


Figura 3.2: Generica cella del dominio (a sinistra) ed esempio di una griglia (a destra)

## 3.2 Simulazione di combustione in un MCI

### 3.2.1 Il toolbox OpenFOAM

OpenFOAM è un codice Open-Source disponibile per i sistemi operativi Linux, costituito da solutori, librerie ed altri strumenti utili per effettuare simulazioni CFD. Fa uso del metodo ai volumi finiti per risolvere sistemi di equazioni differenziali alle derivate parziali in qualunque dominio 3D, rappresentabile attraverso mesh strutturate o non strutturate con celle poliedriche. Permette inoltre la parallelizzazione del calcolo su sistemi multi-processore, necessaria in moltissimi casi di interesse per la fluidodinamica. Ci sono tante valide alternative all'utilizzo di questa piattaforma, spesso si tratta di software commerciali correlati di un'interfaccia grafica interattiva che facilita il compito di preparazione del caso, ed aiuta l'utente a correggere eventuali errori ed inconsistenze derivanti da impostazioni errate. Il problema legato a questi applicativi è che spesso non forniscono la possibilità di consultare il codice sorgente. Per particolari applicazioni, la possibilità di leggere ed utilizzare il codice sorgente diventa una necessità. La potenzialità di OpenFOAM è proprio questa, ovvero la possibilità di creare strumenti personalizzati, basandosi sulle librerie già presenti.

In rete è disponibile tutta la documentazione relativa all'installazione, all'utilizzo ed al funzionamento di OpenFOAM. Con il tempo si è venuta a creare una comunità di utenti e sviluppatori, ed ogni anno si tengono diverse conferenze per permettere un'interazione diretta fra le persone interessate. È possibile inoltre

partecipare a discussioni in rete ed ottenere supporto. La seguente lista indica alcuni siti internet utili riguardanti OpenFOAM, a cui si è fatto riferimento durante questo lavoro di tesi:

- [www.openfoam.org](http://www.openfoam.org) : sito ufficiale. Rilascio nuove versioni, istruzioni d'installazione, features, documentazione
- [www.openfoamwiki.net](http://www.openfoamwiki.net) : OpenFOAM wiki (non ufficiale). Informazioni riguardo OpenFOAM, eventi della comunità e miglione
- [www.foamcfd.org](http://www.foamcfd.org) : documentazione (tesi di dottorato ed articoli accademici) dalle origini (FOAM) al 2006
- [www.cfd-online.com/Forums/openfoam](http://www.cfd-online.com/Forums/openfoam) : OpenFOAM forum

Come conseguenza di tutti gli aspetti introdotti si spiega perché l'interesse verso OpenFOAM sia in continuo aumento, soprattutto nell'ambito della ricerca.

### 3.2.2 La Libreria LibICE

La LibICE (Library for Internal Combustion Engine) è una libreria per OpenFOAM scritta in linguaggio C++ orientato agli oggetti, contenente solutori, modelli fisici ed altri strumenti necessari per le simulazioni CFD dei motori a combustione interna. È uno strumento ideato e creato dal gruppo di ricerca sui motori a combustione interna del Politecnico di Milano, ed è in continua fase di espansione e sviluppo. I principali problemi affrontabili con l'utilizzo della LibICE sono i seguenti:

- Riduzione della formazione degli inquinanti durante la combustione
- Studio di motori Diesel ad iniezione diretta e spray di combustibile
- Algoritmi di movimentazione mesh
- Utilizzo di combustibili alternativi per MCI
- Ottimizzazione del funzionamento dei sistemi di post-trattamento (catalizzatori, SCR, DPF)
- Simulazioni LES in geometrie motore
- Sviluppo di modelli fluidodinamici integrati 1D-3D

Tramite l'utilizzo della LibICE è possibile condurre studi di ricerca molto utili per il miglioramento delle prestazioni degli attuali motori e per lo sviluppo di nuove tecnologie. In questo lavoro di tesi si utilizzerà questo strumento per studiare la combustione PCCI applicata ai motori a combustione interna.



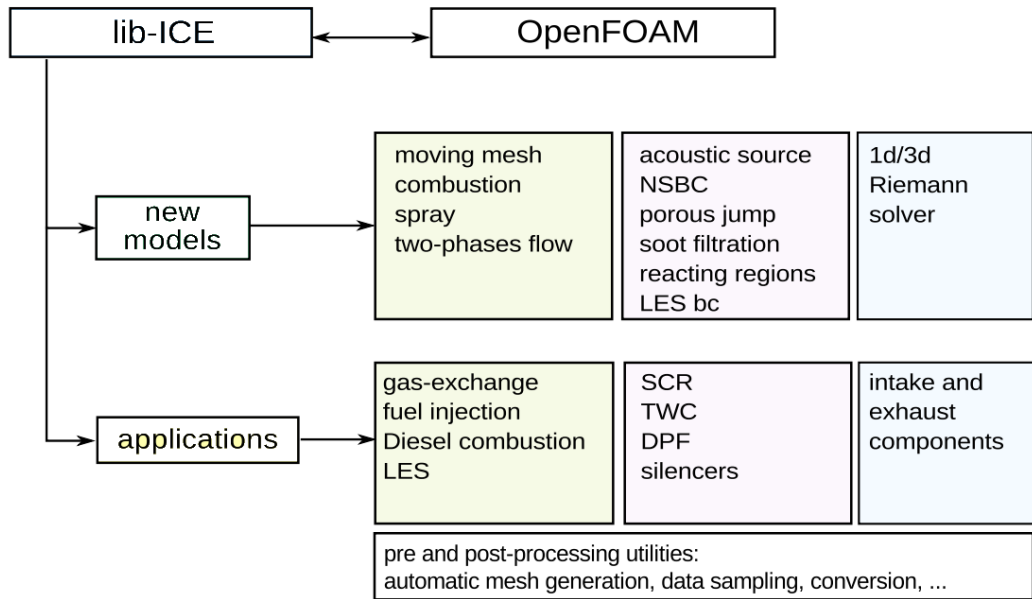


Figura 3.3: Schematizzazione dello strumento LibICE

### 3.3 Il solutore della chimica dettagliata

Lo strumento utilizzato in questo lavoro di tesi per svolgere le simulazioni è il TDACCCMdieselEngineDyMfoam, solutore appartenente alla LibICE e basato sulle librerie per la risoluzione della fluidodinamica già presenti in OpenFOAM.

Questo solutore simula l'evento di combustione integrando direttamente la chimica, basandosi sull'uso di meccanismi di reazione dettagliati, non vengono quindi utilizzati dei modelli chimici per prevedere l'inizio e lo sviluppo della combustione (CTC, RIF, ...). L'approccio seguito per la distribuzione delle specie chimiche è il modello "well-mixed", che implica che ogni cella del dominio venga trattata come un reattore chimico chiuso perfettamente omogeneo, si calcolano quindi le velocità delle reazioni chimiche coinvolte ad ogni istante computazionale in accordo alle condizioni termodinamiche  $(Y_i, T, p)$  della cella stessa. Per ottenere questo risultato si utilizza un solutore dei sistemi di equazioni differenziali ordinarie *stiff*, che si occupa dell'integrazione della chimica. In seguito a questa fase, si risolvono l'equazione dell'energia e le equazioni del trasporto delle specie chimiche, aggiornandole con le quantità prodotte o consumate dalle reazioni chimiche. Le frazioni massiche delle specie vengono aggiornate secondo la 3.12:

$$Y_i^*(t + \Delta t) = Y_i(t) + \int_t^{t+\Delta t} \dot{\omega}_i \frac{W_i}{\rho} dt' \quad (3.12)$$

che viene risolta utilizzando metodi iterativi impliciti. La velocità di reazione di ogni specie viene poi calcolata con la 3.13 ed inserita nella rispettiva equazione del trasporto (3.8):

$$\dot{Y}_i = \frac{Y_i^*(t + \Delta t) - Y_i(t)}{\Delta t} \quad (3.13)$$

dove  $\Delta t$  è il passo di integrazione temporale utilizzato dalla chimica (in genere molto più piccolo di quello della fluidodinamica).

Il vantaggio principale del modello *well-mixed* risiede nella sua flessibilità, sia nei confronti del meccanismo di reazione utilizzato che della composizione del combustibile. Nonostante non tenga in considerazione effetti di interazione fra la chimica e la turbolenza, questo modello è stato applicato per anni con successo a diversi casi di combustione, Diesel tradizionale, SI, HCCI e PCCI ([18] [19] [20]). La capacità di previsione della fiamma di questo modello è stata ampiamente indagata. Si rimanda alla bibliografia per approfondimenti sull'argomento ([21] [22] [23]). Veniamo ora all'analisi dell'effettiva modalità con cui la chimica viene integrata nelle celle della griglia. L'integrazione della chimica dettagliata cella per cella è computazionalmente molto esigente, e richiederebbe tempi di calcolo insostenibili per gli studi ingegneristici, soprattutto quando si ha a che fare con un alto numero di celle e con combustibili complessi, il cui comportamento è descritto da pesanti meccanismi cinetici. Quando si simula un motore a combustione interna, è necessario far fronte ad un elevato carico computazionale, causato da fenomeni quali l'evoluzione dello spray, la movimentazione della griglia e lo scambio termico. Tali aspetti rendono ancora più difficile rappresentare accuratamente la chimica. Nelle simulazioni dei motori Diesel tradizionali così come nei motori Otto, caratterizzati da accensioni comandate dall'esterno, il ruolo della chimica viene in parte ridimensionato ed è permesso riprodurre il comportamento tramite alcuni modelli semplificativi (CTC, RIF, ...). Per i motori HCCI e PCCI si è invece detto che la cinetica chimica costituisce un aspetto fondamentale per la previsione del momento di auto-accensione, non è possibile quindi utilizzare tali tipi di semplificazioni senza inficiare i risultati. La soluzione alla necessità di risolvere una cinetica chimica dettagliata, senza rendere eccessivamente alto il tempo di calcolo, si trova applicando particolari metodologie per alleggerire il carico computazionale:

- Utilizzo di condizioni periodiche per la riduzione del dominio computazionale
- Chimica multi-zona
- Riduzione del meccanismo di reazione
- Tabulazione

La prima metodologia, che riguarda semplicemente la grandezza del dominio da trattare, verrà discussa nel paragrafo 4.1.1 dedicato alla preparazione di un caso, mentre le altre tre, che riguardano il modo in cui viene affrontata la soluzione della chimica, verranno trattate nel seguente paragrafo.

### 3.3.1 Le tecniche per la riduzione del tempo di calcolo della chimica

L'uso della cinetica chimica dettagliata in CFD permette di migliorare l'accuratezza dei risultati, in particolare la previsione del ritardo d'accensione, il tasso di rilascio del calore e la produzione di inquinanti, rispetto ai modelli di reazione empirici ([19] [24]).

Utilizzando la cinetica chimica dettagliata, il tempo da dedicare alla soluzione della chimica diventa considerevolmente maggiore di quello per risolvere le equazioni del trasporto. I progressi effettuati nello studio della combustione, hanno portato i ricercatori a sviluppare nuovi e complessi meccanismi chimici per migliorare l'accuratezza dei risultati CFD. All'aumentare della grandezza del meccanismo di reazione utilizzato, il tempo computazionale speso per la soluzione della chimica cresce in misura pari al quadrato o al cubo del numero delle specie chimiche [25].

In una simulazione di combustione di un MCI, l'integrazione della chimica cella per cella richiederebbe tempi di calcolo eccessivi (7-10 giorni in calcolo parallelizzato), anche utilizzando meccanismi chimici "ridotti" con circa 50-100 specie chimiche. È quindi necessario accelerare la parte relativa alla soluzione della chimica nelle simulazioni di combustione in MCI, per rendere possibile l'utilizzo di tali meccanismi chimici in tempi ragionevoli.

### 3.3.2 Chemistry Coordinate Mapping

Per *Chemistry Coordinate Mapping*, o chimica multi-zona coordinata, si intende una tecnica utilizzata per ridurre il tempo di calcolo legato alla chimica, creando un dominio chimico "basso-dimensionale" computazionalmente meno esigente. Ogni cella del dominio fisico è infatti descritta dalle frazioni massiche delle  $n$  specie appartenenti al meccanismo di reazione, alle quali si aggiungono  $p$  e  $T$ , è quindi rappresentabile dal vettore  $(Y_1, Y_2, \dots, Y_n, p, T)$  di dimensione  $(n + 2)$ . Il dominio chimico, nel quale si vogliono mappare le celle del dominio fisico, sarà invece descritto solo da due o tre parametri e sarà quindi bi-dimensionale o tri-dimensionale. Per ottenere questo risultato si deve effettuare un'operazione di divisione in zone, le quali compongono il dominio chimico, ed assegnare ogni cella del dominio fisico ad una particolare zona. È possibile, con il solutore TDACCCMdieselEngineDyM-Foam, scegliere se effettuare una divisione in zone su due parametri,  $(Z1, Z2)$  e quindi bidimensionale, o su tre parametri,  $(Z1, Z2, Z3)$  e quindi tridimensionale.

L'approccio da noi utilizzato opera una divisione in zone su due parametri e viene spiegato di seguito.

Il modello di chimica multi-zona fu introdotto da Aceves et. al. [26] per la soluzione della chimica in un motore HCCI con una tecnica sequenziale, valevole per casi a composizione chimica omogenea. In questo approccio si prevedeva la soluzione della sola fluidodinamica fino al momento di inizio della combustione, istante dal quale il dominio veniva poi suddiviso in diverse zone sulla base del valore locale di temperatura. Le celle della griglia caratterizzate da una temperatura simile (e quindi da una cinetica chimica simile) venivano incluse all'interno della stessa zona, tramite un'operazione di mappatura, fino ad arrivare a creare un numero limitato di zone costituenti il dominio chimico (circa 10-100). Così facendo, ad ogni zona appartenente al dominio chimico corrispondono più celle del dominio fisico, consentendo di risolvere sistemi di equazioni di dimensione inferiore e di ridurre il tempo di calcolo legato alla chimica. Dal punto di transizione in poi la chimica veniva risolta separatamente in ognuna delle zone create, trascurando gli effetti della turbolenza e dello scambio di massa e di calore fra le varie zone. Questo modello permetteva di prevedere con buona accuratezza il picco di pressione, la durata della combustione e la relativa efficienza, non consentiva invece una buona previsione degli UHC e del CO prodotti.

Il metodo di Aceves et. al. è stato esteso da Flowers et. al. [27] e Babajimopoulos et. al. [28], per permettere l'accoppiamento del dominio fisico e di quello chimico utilizzando una tecnica di mappatura interattiva, raffigurata in figura 3.4. L'idea di base è quella di dividere ogni passo temporale in due fasi, una dedicata alla chimica ed una dedicata al trasporto delle specie. Secondo questo approccio le celle vengono mappate nel dominio chimico sulla base dei valori di temperatura e della composizione chimica, e trattate come singoli reattori perfettamente miscelati, assumendo l'ipotesi che si possano trascurare le interazioni fra la chimica e la turbolenza (modello *well-mixed*, [21] [30]).

Successivamente all'integrazione della chimica, i risultati di ogni zona vengono rimappati nel dominio fisico cercando di rispettare i criteri di conservazione degli elementi e dell'energia. Questo metodo proposto da Babajimopoulos è stato implementato nella Lib-ICE ed il solutore TDACCCMdieselEngineDyMFoam ne fa uso.

Si introducono ora le grandezze scelte per rappresentare il dominio chimico. Solitamente, una delle grandezze utilizzate per la divisione in zone è la temperatura, parametro che ha una grande influenza sulla velocità delle reazioni chimiche. Oltre alla temperatura, risulta necessario scegliere un altro parametro, che sia rappresentativo della composizione chimica di ogni cella, in quanto l'utilizzo delle frazioni massiche  $Y_i$  di ogni specie sarebbe computazionalmente troppo pesante.

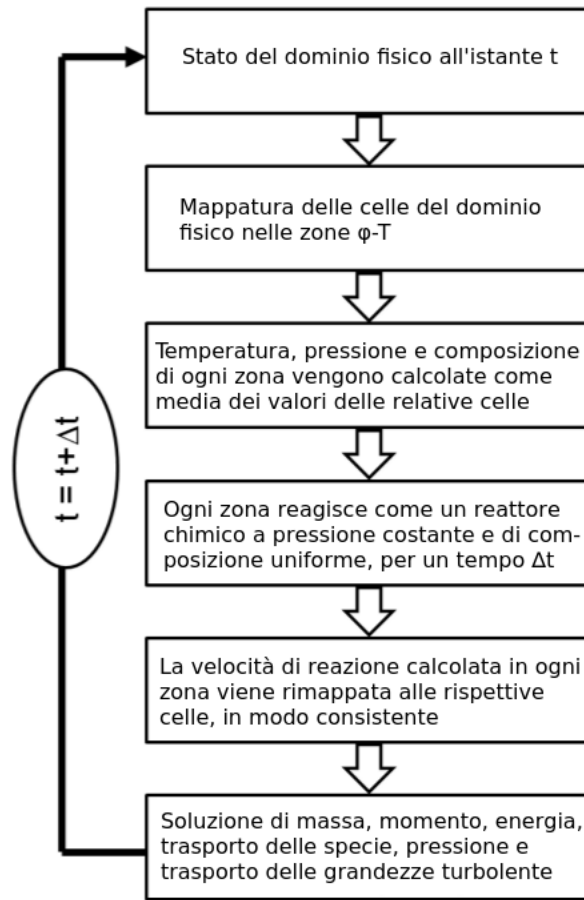
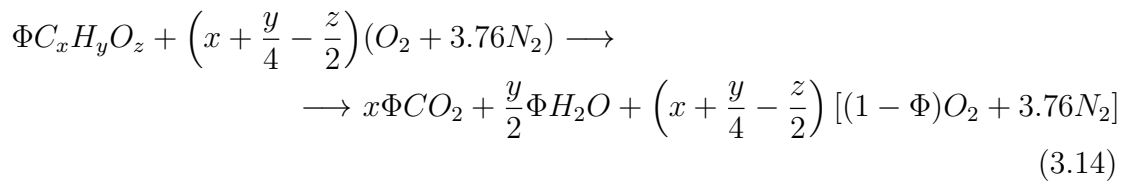


Figura 3.4: Procedura per la mappatura proposta da Babajimopoulos

La generica reazione di ossidazione di un combustibile in aria si può scrivere:

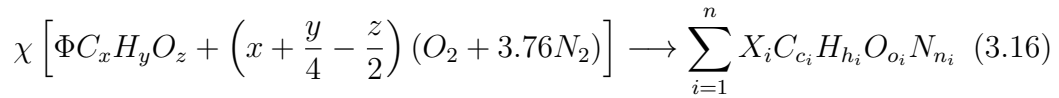


dove  $\Phi$  è il rapporto d'equivalenza combustibile-aria, x, y e z il numero di atomi di carbonio, idrogeno e ossigeno presenti nella molecola che rappresenta il combustibile. Il rapporto di equivalenza combustibile-aria  $\Phi$  può essere utilizzato come parametro indice della composizione chimica delle celle. Per sua natura, non consente una esatta previsione dell'istante di autoaccensione della miscela, è importante quindi la ricerca di altri parametri che possano svolgere questo compito.

$$\Phi = \frac{(\text{combustibile}/\text{aria})}{(\text{combustibile}/\text{aria})_s} \quad (3.15)$$

L'equazione 3.14 descrive il processo globale e non riporta le specie intermedie che si vengono a formare durante l'ossidazione della molecola di combustibile.

La generica specie intermedia che si forma durante il processo può essere descritta dalla seguente equazione:



dove  $n$  indica il numero totale delle specie incluse nel meccanismo di reazione,  $X_i$  è la frazione molare della specie  $i$ -esima nella miscela,  $c_i$ ,  $h_i$ ,  $o_i$  ed  $n_i$  sono il numero di atomi di carbonio, idrogeno, ossigeno ed azoto presenti nella generica specie intermedia, ed infine  $\chi$  è un fattore di normalizzazione tale che  $\sum_{i=1}^n X_i = 1$ .

Babajimopoulos et. al. [28] mostrano come in caso di combustioni molto magre, in presenza di un alto grado di ricircolo dei gas combusti (contenenti alte quantità di ossigeno residuo), un miglior indicatore del rapporto di equivalenza è costituito dal rapporto di equivalenza combustibile-ossigeno  $\Phi^*$  così definito:

$$\Phi^* = \frac{(\text{combustibile}/O_2)}{(\text{combustibile}/O_2)_s} \quad (3.17)$$

Un ulteriore modo per indicare il contenuto di combustibile è il rapporto di equivalenza progressivo  $\varphi$ :

$$\varphi = \frac{2C_{-CO_2}^{\#} + \left( H_{-H_2O}^{\#}/2 \right) - z' C_{-CO_2}^{\#}}{O_{-CO_2-H_2O}^{\#} - z' C_{-CO_2}^{\#}} \quad (3.18)$$

nel quale  $C_{-CO_2}^{\#}$  rappresenta il numero totale di atomi di carbonio presenti nella miscela, al quale vengono sottratti quelli contenuti in molecole di anidride carbonica ( $CO_2$ ),  $H_{-H_2O}^{\#}$  il numero totale di atomi di idrogeno al quale vengono sottratti quelli contenuti in molecole di acqua ( $H_2O$ ), e  $O_{-CO_2-H_2O}^{\#}$  il numero totale di atomi di ossigeno al quale vengono sottratti quelli contenuti in anidride carbonica ed acqua;  $z'$  rappresenta invece il rapporto fra il numero di atomi di ossigeno e quelli di carbonio  $z/x$  presenti nella generica molecola di combustibile dell'equazione 3.14.

Questo parametro può variare dal valore di  $\Phi$  (solo reagenti) a zero (prodotti di combustione completa), dipendendo dal livello locale di completamento della combustione; esso è quindi un parametro importante per comprendere lo stato di avanzamento delle reazioni di ossidazione cella per cella, dando la possibilità

di mappare le celle all'interno delle zone più appropriate. Al fine di valutare il rapporto di equivalenza progressivo è necessario conoscere il numero di atomi di carbonio, idrogeno ed ossigeno presenti nella miscela. Il numero di atomi di carbonio è calcolabile con l'equazione 3.19

$$C^\# = \sum_{i=1}^n N_i c_i = \sum_{i=1}^n X_i N_{tot} c_i = N_{tot} \sum_{i=1}^n X_i c_i \quad (3.19)$$

equazioni analoghe sono utilizzate per il calcolo del numero di atomi di idrogeno e di ossigeno. Fra i tre parametri introdotti, rapporto di equivalenza combustibile-aria, rapporto di equivalenza combustibile-ossigeno e rapporto di equivalenza progressivo, quest'ultimo si dimostra essere quello con la migliore capacità di prevedere l'esatto momento di accensione [28].

Di conseguenza la coppia di parametri utilizzata dal solutore TDACCCMdieSELengineDyMFoam per la mappatura del dominio chimico sono il rapporto di equivalenza progressivo e la temperatura  $(\varphi, T)$ .

Il numero di zone creato dal CCM ad ogni istante computazionale non è fisso, ma strettamente dipendente dalle disomogeneità della temperatura e del rapporto di equivalenza della miscela contenuta nel dominio, e dai parametri impostati dall'utente. Infatti è possibile specificare quale ampiezza di  $\varphi$  e  $T$  debba avere ogni zona. L'ampiezza influisce sul numero di zone create e sull'accuratezza ottenibile. È fondamentale adottare un'ampiezza delle zone che possa rendere il metodo computazionalmente efficiente ma che allo stesso tempo sia sufficientemente accurato.

## Mappatura delle celle nel dominio chimico

L'obiettivo da raggiungere è quello di passare dal dominio fisico, descritto dalle grandezze  $(Y_i, p, T)$  e quindi  $(n + 2)$  dimensionale, a quello chimico, descrivibile dalle grandezze  $(\varphi, T)$  e quindi bi-dimensionale. Questo passaggio permette di risolvere la chimica in una "griglia" descritta da un numero molto inferiore di variabili, la cui soluzione è molto più semplice rispetto a quanto sarebbe l'integrazione diretta in ogni cella. La tecnica di mappatura è fondamentale, la scelta delle grandezze che rappresentano il dominio chimico e l'ampiezza delle zone deve essere ragionata approfonditamente per non privare di senso fisico i risultati che il metodo può generare.

L'utente deve quindi stabilire il valore di due parametri utilizzati per la mappatura, chiamati *span* di Z1 e di Z2:  $\Delta\varphi$  e  $\Delta T$ . Il solutore, ad ogni istante computazionale, valuterà il valore massimo e minimo delle grandezze  $\varphi$  e  $T$  nel dominio, e calcolerà il numero di divisioni richieste da ognuno dei due parametri:

$$\begin{aligned} N_\varphi &= (\varphi_{max} - \varphi_{min})/\Delta\varphi \\ N_T &= (T_{max} - T_{min})/\Delta T \end{aligned} \quad (3.20)$$

Dai valori calcolati di  $N_\varphi$  e  $N_T$  è necessario ottenere un numero intero operando un'approssimazione, al fine di ottenere il numero reale di intervalli  $N_\varphi^*$  e  $N_T^*$  che si vuole costruire. Il valore di ampiezza reale sarà quindi

$$\begin{aligned} \Delta\varphi^* &= (\varphi_{max} - \varphi_{min})/N_\varphi^* \\ \Delta T^* &= (T_{max} - T_{min})/N_T^* \end{aligned} \quad (3.21)$$

Il numero totale di zone sarà ottenuto quindi con  $N_{tot} = \Delta\varphi^* * \Delta T^*$ .  
I valori di  $\varphi$  e  $T$  che delimitano le varie zone valgono

$$\begin{aligned} \varphi_k &= \varphi_{min} + k * \Delta\varphi^* \\ T_j &= T_{min} + j * \Delta T^* \end{aligned} \quad (3.22)$$

con  $k = 0, \dots, N_\varphi^*$  e  $j = 0, \dots, N_T^*$ , e quindi

$$\begin{aligned} \varphi_k &= [\varphi_{min}, \varphi_1, \dots, \varphi_{max}] \\ T_j &= [T_{min}, T_1, \dots, T_{max}] \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ogni cella del dominio sarà quindi mappata all'interno della zona  $(k, j)$  che soddisfa

$$\begin{aligned} \varphi_{k-1} &< \varphi_{cella} < \varphi_k \\ T_{j-1} &< T_{cella} < T_j \end{aligned} \quad (3.24)$$

Una volta terminata l'operazione di mappatura, sarà necessario calcolare dei valori  $(\bar{\varphi}, \bar{T})$  di riferimento per ogni zona, ottenuti come media dei valori  $(\varphi, T)$  relativi ad ogni cella. Sulla base dei valori di riferimento calcolati, si ottengono le informazioni necessarie all'integrazione della chimica, e si esegue il calcolo delle velocità di reazione utilizzando l'equazione 3.13 del modello “*well-mixed*”.

Il numero di zone varia dinamicamente durante la simulazione, per adattarsi alle distribuzioni di temperatura e rapporto di equivalenza incontrate. Non è insolito che fra le zone create ce ne sia qualcuna alla quale non venga assegnata nessuna cella del dominio fisico. Tali zone rimangono pertanto inattive e non verrà effettuato nessuna integrazione della chimica per le condizioni di  $\bar{\varphi}$  e di  $\bar{T}$  corrispondenti.



### Rimappatura delle celle nel dominio fisico

Una volta calcolate le velocità di reazione di ogni zona, bisogna rimappare i risultati nelle celle del dominio fisico. L'operazione non è banale e deve garantire la conservazione degli elementi. La strategia utilizzata è quella proposta da Babajimopoulos [28], basata sul valore “ $ch$ ” delle celle:

$$ch_{cella} = 2C_{CO_2}^\# + \frac{H^\# - H_2O}{2} \quad (3.25)$$

Questo valore viene calcolato per ogni cella del dominio fisico. Poi si calcola il valore  $ch_{zona}$  relativo ad ogni zona come somma dei valori  $ch_{cella}$  di ogni sua cella. Dopo aver effettuato il calcolo della chimica, tutte le specie prodotte nell'istante computazionale viene ridistribuito dalla zona ad ogni cella del dominio fisico in misura proporzionale al relativo valore  $ch_{cella}$ , eccetto  $CO_2$ ,  $H_2O$ ,  $O_2$  ed  $N_2$ , che vengono trattate separatamente.

$$\dot{\omega}_{i,cella} = \frac{ch_{cella}}{ch_{zona}} \dot{\omega}_{i,zona} \quad (3.26)$$

L'equazione 3.26 garantisce che la massa di ogni zona sia conservata. Questa interpolazione potrebbe però causare un piccolo aumento del numero degli atomi di carbonio o di idrogeno, in qualche cella. Per risolvere il problema, si agisce correggendo la velocità di reazione della  $CO_2$  per correggere il numero di atomi di carbonio, e dell' $H_2O$  per correggere quello degli atomi di idrogeno:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\dot{\omega}_{i,cella}}{W_i} c_i + \frac{\dot{\omega}_{CO_2,cella}}{W_{CO_2}} = 0 \quad (3.27)$$

$$\sum_{i=1}^n \frac{\dot{\omega}_{i,cella}}{W_i} h_i + 2 \frac{\dot{\omega}_{H_2O,cella}}{W_{H_2O}} = 0 \quad (3.28)$$

Se viene aggiustata la velocità di reazione di  $CO_2$  e  $H_2O$ , deve di conseguenza essere aggiustata la velocità di reazione dell' $O_2$ :

$$\sum_{i=1}^n \frac{\dot{\omega}_{i,cella}}{W_i} o_i + 2 \frac{\dot{\omega}_{O_2,cella}}{W_{O_2}} = 0 \quad (3.29)$$

Infine, l' $N_2$  viene utilizzato per riportare ogni cella alla propria massa originale. Al termine della rimappatura si ritorna alla fluidodinamica tradizionale nel dominio fisico di partenza, si risolvono quindi le equazioni di massa, quantità di

moto, trasporto delle specie, trasporto delle grandezze turbolente, pressione ed energia. L'accuratezza della tecnica CCM è tanto maggiore quanto più piccola è l'ampiezza delle zone definite dall'utente. Il metodo descritto in questo paragrafo è stato dimostrato essere accurato sia per combustioni HCCI che PCCI ([28] [29]).

### 3.3.3 Riduzione del meccanismo di reazione

L'operazione richiesta per risolvere la chimica all'interno del dominio dipende dalla grandezza della griglia e del meccanismo di reazione. Al crescere del numero delle specie contenute nel meccanismo di reazione cresce di conseguenza la dimensione del sistema di equazioni differenziali da risolvere, aumentando la complessità dell'operazione. Per ridurre il tempo computazionale necessario per l'integrazione della chimica si può operare una riduzione del meccanismo di reazione. La riduzione viene effettuata "*online*", e quindi ad ogni istante computazionale, alle particolari condizioni termodinamiche che caratterizzano la zona che richiede l'integrazione della chimica. Sono disponibili diversi algoritmi per assolvere questo compito: DAC, DRG, DRGEP, PFA ed EFA.

Questi metodi si basano sull'analisi di una variabile quantitativa che rappresenta quanto è intenso il legame che lega diverse specie chimiche. Per comprenderlo, si valuta l'effetto provocato dalla rimozione di una specie dal meccanismo sul tasso di produzione di un'altra. Questi algoritmi permettono la creazione di alcuni schemi che danno una interpretazione visiva dei legami fra le specie chimiche attraverso linee e nodi. Le linee rappresentano un legame forte, i nodi le specie chimiche coinvolte [31].

La differenza fra i vari metodi è come questi valutano la forza dei legami. La figura 3.5 raffigura la rete di legami nel meccanismo di reazione del n-Eptano, in un particolare istante di funzionamento di un motore HCCI, tramite un insieme di linee. Ad esempio, il metodo DRG considera solo le linee dirette che collegano due specie, la forza del legame viene quindi descritta dalla sua linea più debole [32].

La riduzione viene effettuata ad ogni chiamata dell'integratore della chimica, e vengono calcolati dapprima i legami diretti fra le specie. In seguito l'algoritmo valuta la forza delle linee che connettono le specie contenute in una lista definita dall'utente, per iniziare la ricerca dei legami deboli. La lista di specie che è stata utilizzata nelle simulazioni di questo lavoro di tesi ha la seguente struttura:

- Combustibile
- $CO$
- $CO_2$
- $HO_2$

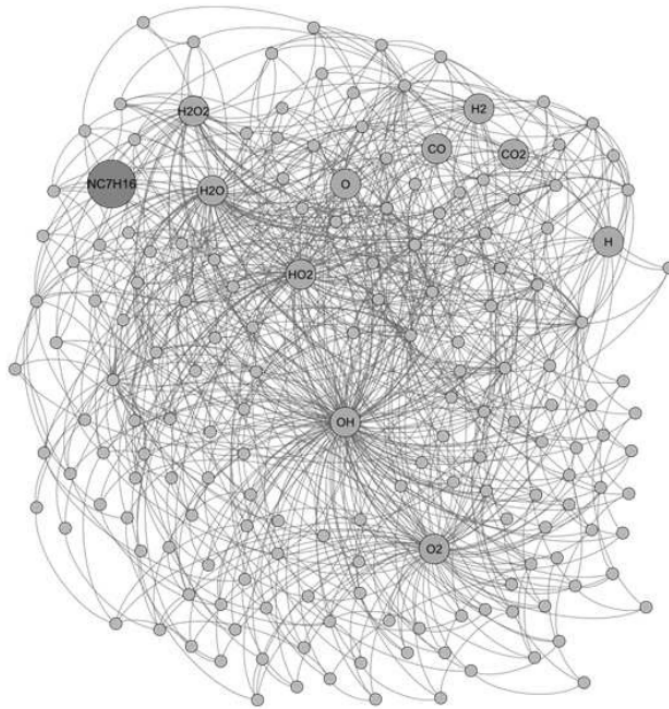


Figura 3.5: Esempio di schema creato dal metodo DRG

- $H_2O$
- $NO$  per la corretta valutazione delle emissioni di  $NO_x$
- $C_2H_2$  come precursore per la formazione di particolato (spiegazione al paragrafo 4.1.2)

Alla fine di questa operazione, tutte le specie caratterizzate da legami di forza inferiore ad un valore di soglia definito dall'utente vengono disabilitate. Vengono poi rimosse dal meccanismo di reazione quelle reazioni chimiche che coinvolgono almeno una specie disabilitata. È importante notare che il meccanismo di riduzione "online" prevede che una specie, che venga disabilitata in certi istanti computazionali, possa ritornare attiva in altri, quando il valore di forza dei legami supera il valore di soglia. Per le specie disabilitate caratterizzate da massa iniziale pari a zero, si mantengono comunque nel meccanismo le informazioni loro riguardanti, in quanto queste potrebbero apparire in momenti successivi e giocare un ruolo importante nelle reazioni chimiche. Per le specie disabilitate e con massa iniziale diversa da zero, si risolve solo l'equazione del trasporto. In aggiunta, queste specie disabilitate continuano a contribuire nelle velocità di alcune particolari reazioni

come terzi corpi. In genere il risparmio di tempo computazionale ottenuto dalla riduzione del meccanismo compensa ampiamente quello speso dall'algoritmo, senza provocare una apprezzabile perdita di accuratezza dei risultati.

### 3.3.4 Tabulazione

Il solutore dà la possibilità di utilizzare un ulteriore metodo per la riduzione del tempo di calcolo, chiamato tabulazione. Questo metodo permette di salvare i risultati ottenuti dall'integrazione della chimica e relativi ad una condizione termo-chimica  $(Y_i, T, p)$ , al fine di renderli riutilizzabili in un secondo momento per un'altra zona del dominio caratterizzata da una condizione simile.

Tuttavia questa metodologia ha dimostrato di essere inaccurata se utilizzata congiuntamente al CCM. Nelle simulazioni svolte in questo lavoro di tesi si è fatto uso solo del CCM e della riduzione del meccanismo di reazione.

## Capitolo 4

# Preparazione di un caso e simulazioni di prova

Dopo aver introdotto le basi teoriche che riguardano la fluidodinamica computazionale e la simulazione della combustione, si passa alla descrizione dei passaggi che è necessario seguire per affrontare un caso con OpenFOAM e la LibICE.

In questo capitolo si descrive quindi come sono stati utilizzati alcuni strumenti software ed in particolare il solutore della chimica dettagliata, per simulare alcuni casi test di combustione HCCI e PCCI. Si parlerà infine di alcune delle problematiche incontrate e si discuterà dei risultati ottenuti.

### 4.1 Preparazione di un caso

Per poter affrontare uno studio CFD di combustione in un MCI è fondamentale ragionare su una serie di aspetti. Innanzitutto è necessario definire un obiettivo, questo è il primo passo per gettare le basi dello studio e capire come procedere. È necessario identificare la condizione operativa che si vuole studiare, e quindi definire il regime di rotazione del motore  $n$ , la temperatura e la pressione dei gas contenuti nel motore all'inizio della fase di compressione, il livello di carico richiesto al motore e che tipo di miscela si desidera. Se si desidera utilizzare una miscela perfettamente omogenea (condizione HCCI), il combustibile deve essere incluso nella massa di gas iniziale al momento di inizio della simulazione, se invece si vuole utilizzare una carica premiscelata con un certo grado di disomogeneità (condizione PCCI), nella massa di gas iniziale si avrà solo aria ed eventualmente gas riciclati, mentre per l'immissione di combustibile si dovrà decidere l'angolo di manovella in cui far cominciare l'iniezione. Nei prossimi paragrafi si spiegherà come tradurre tutte le informazioni riguardanti la combustione, al fine di creare un caso CFD da risolvere con l'utilizzo di OpenFOAM e della LibICE.

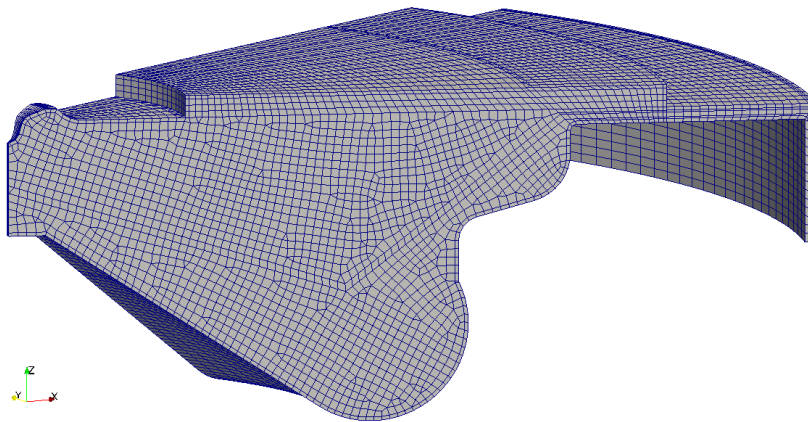


Figura 4.1: Esempio di griglia che costituisce una frazione del volume interno di un motore

#### 4.1.1 Movimentazione della griglia

Si descriverà ora quale deve essere la struttura generica della griglia da utilizzare. Come introdotto nel paragrafo 3.3, uno dei metodi per ridurre il carico computazionale è quello dell'utilizzo di condizioni al contorno periodiche, che permettono di simulare solo una frazione del dominio, riducendo quindi il numero di celle da trattare ed il numero di equazioni da risolvere. Nel caso dei motori a combustione interna, la grandezza minima della frazione simulabile è vincolata dal numero di ugelli dell'iniettore. Ad esempio, per un motore il cui iniettore è costituito da 8 ugelli, disposti sulla circonferenza a distanza di 45 gradi l'uno dall'altro, il dominio computazionalmente può rappresentare solo 1/8 del dominio reale. Si crea quindi una griglia a forma di settore, con ampiezza di 45 gradi, nel quale viene simulata la creazione e l'evoluzione di un singolo spray invece degli otto che esistono nel dominio intero. Quando la LibICE opera con tale tipo di settore simula il funzionamento di un motore composto da 8 settori identici. Così facendo non è possibile includere nella geometria le valvole di aspirazione e scarico, ed eventuali altri particolari geometrici non periodici. Le simulazioni svolte con griglie di questo tipo consentono di simulare solo l'intervallo di tempo in cui le valvole sono chiuse, quindi fra la chiusura della valvola di aspirazione (IVC) e l'apertura della valvola di scarico (EVO). In figura 4.1 si può vedere la struttura di un settore di 45 gradi del volume interno ad un motore. Questa griglia è costituita da celle e da superfici di confine, dette anche *patch*. In particolare, per una griglia così strutturata, si hanno 4 patch, visualizzabili in figura 4.2: la parete del cilindro (*liner*), la testa del pistone (*piston*), la testa del cilindro (*cylinderHead*) e le pareti "virtuali" laterali,

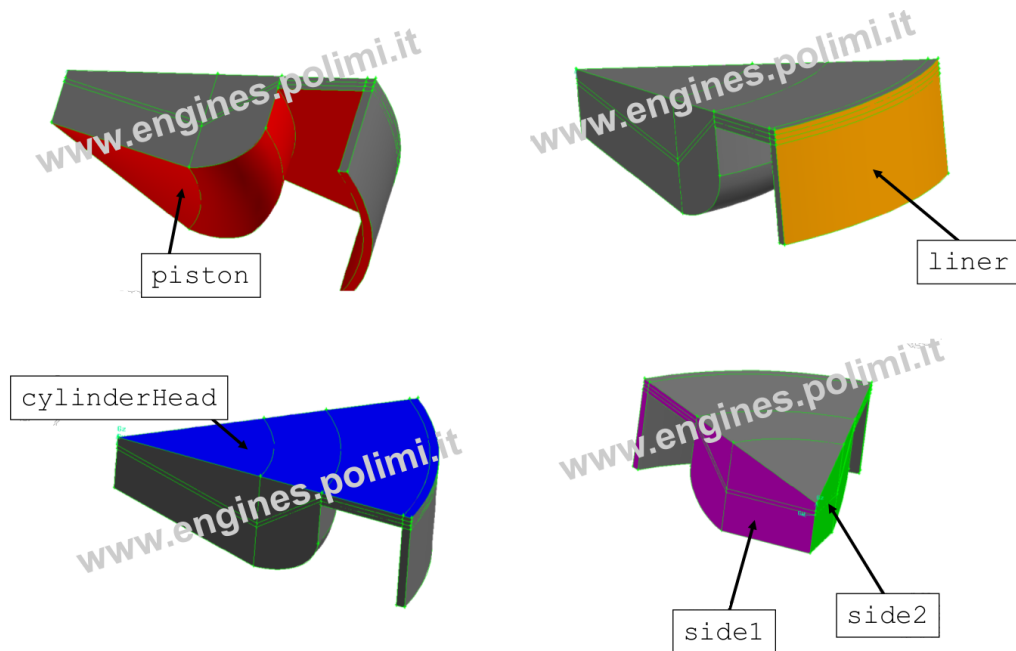


Figura 4.2: Patch che costituiscono la superficie di contorno della griglia

necessarie per impostare le condizioni di periodicità (*side1*, *side2*). Per ognuna di queste patch, durante la fase di Pre-Processing, si dovrà specificare una opportuna condizione iniziale, per definire il comportamento delle grandezze su queste superfici di confine (ad esempio velocità nulla oppure fissa, parete adiabatica oppure a temperatura fissa, ...). Per permettere al solutore di trattare le superfici laterali del settore con la condizione di periodicità, è necessario cambiare la tipologia di queste patch e farle diventare *cicliche*. Per fare ciò si utilizza uno strumento della LibICE per creare nuove patch, partendo dalle informazioni recuperate da un dizionario apposito chiamato *createPatchDict*. Per richiamare questo strumento è necessario digitare nel terminale linux il comando:

```
createPatch -case "nome del caso" -overwrite
```

così facendo le patch nominate *side1* e *side2* diventeranno patch di tipo ciclico, e verrà cambiato il loro nome in *cyc\_half1* e *cyc\_half2*. Per simulare il movimento del pistone del motore, il solutore deve trattare una griglia dinamica che varia ad ogni istante computazionale coerentemente con la struttura del manovellismo ed il regime di rotazione. La griglia viene modificata ad ogni istante computazionale attraverso un'operazione di aggiunta/rimozione di strati, per rispettare l'altezza corretta che viene imposta dalla geometria del manovellismo. Il numero di strati presenti e l'operazione di aggiunta e rimozione

viene gestita da un algoritmo, in modo da rispettare il valore minimo e massimo, imposto dall'utente, per l'altezza degli strati.

Prima di costruire un nuovo caso, è necessario eseguire una movimentazione completa della mesh, che consiste in una rotazione di oltre 360 gradi della manovella (di solito si simula da -360 a +20 CAD). Questa operazione deve essere eseguita per tre motivi:

- Controllare che la griglia generata non dia problemi durante la movimentazione
- Ottenere la geometria della griglia all'angolo di manovella che corrisponde all'istante iniziale della simulazione
- Creare i file necessari per la decomposizione del dominio in un particolare numero di processori, necessari per il calcolo parallelizzato

La movimentazione della griglia si esegue creando un caso apposito, nel quale si deve inserire la geometria della griglia al TDC. Si dovrà creare una cartella contenente due sottocartelle: *constant* e *system*. La cartella *constant* deve contenere:

- il file *engineGeometry*: contiene i parametri relativi al motore e necessari alla movimentazione, fra cui alesaggio, corsa, lunghezza della biella, regime di rotazione, intensità del moto di swirl, altezza massima e minima degli strati.
- la cartella *polyMesh*: contiene i file che descrivono la geometria della griglia al TDC.

La cartella *system* deve contenere i file:

- *controlDict*: definisce il passo temporale per la movimentazione e l'intervallo di scrittura dei risultati.
- *decomposeParDict*: definisce il metodo da utilizzare per la decomposizione del dominio ed il numero di domini da creare.
- *fvSchemes*, *fvSolution*: contengono gli schemi numerici e le tolleranze da utilizzare.
- *topoSetDict*: utilizzato dall'algoritmo di movimentazione

È importante utilizzare un passo temporale adeguato al fine di eseguire correttamente l'operazione, è consigliabile utilizzare un valore pari a 0.1 CAD. Si deve inoltre impostare un intervallo di scrittura dei risultati tale da scrivere l'istante corrispondente all'angolo di manovella di chiusura della valvola di aspirazione (IVC);



la griglia generata a quell'istante servirà per generare il caso della combustione. L'effettiva decomposizione del dominio sarà effettuata in un secondo momento utilizzando il metodo *manual*, il quale necessita dei file *engineCylinderDecomposition* che vengono però creati durante l'operazione di movimentazione. È quindi necessario impostare, prima di eseguire la movimentazione, il numero di processori che si vorrà utilizzare per la simulazione di combustione, in quanto non sarà più possibile cambiarlo in seguito (se non eseguendo un'altra movimentazione).

Per eseguire la movimentazione e controllare che tutto sia andato a buon fine, è necessario seguire i seguenti passi:

1. Decidere il numero di processori su cui si vorrà dividere il dominio e scriverlo nel file *system/decomposeParDict*
2. Impostare 0.1 come passo temporale, -360 come istante iniziale e +20 come istante finale
3. Cancellare eventuali file *engineCylinderDecomposition* presenti nella cartella *constant*, e *pointZones*, *faceZones*, *cellZones* all'interno di *constant/polymesh*
4. Lanciare il comando *makeEngineMesh*
5. Lanciare il comando *decomposeCylinderMesh*
6. Far partire la movimentazione con *moveEngineTopoMesh*
7. Controllare che l'algoritmo non abbia dato messaggi di errore
8. Utilizzare lo strumento *checkMesh* come prova definitiva che la griglia non presenti problemi in nessun degli istanti scritti durante la movimentazione.

È fondamentale che questa procedura sia effettuata correttamente, per poter notare e correggere eventuali problemi di griglia o di movimentazione, prima che si costruisca il caso riguardante la simulazione della combustione, evitando da subito potenziali perdite di tempo.

#### 4.1.2 Creazione del caso e Pre-Processing

Per simulare la combustione si dovrà creare un'altra cartella, così strutturata:

- *IVC*
- *chemkin*
- *constant*
- *system*

La sotto-cartella *IVC* contiene la griglia e le condizioni iniziali ed al contorno delle grandezze fisiche ( $Y_i, T, p, k, \varepsilon, \dots$ ), all'angolo di manovella che corrisponde con la chiusura della valvola di aspirazione. La griglia, nello stato che deve assumere alla chiusura della valvola di aspirazione e quindi lo stato iniziale della simulazione, deve essere presa dalla cartella dei risultati della movimentazione e copiata nella cartella *IVC*. La sotto-cartella *chemkin* contiene il meccanismo di reazione per il combustibile selezionato ed il file contenente le proprietà termofisiche delle specie, relative alla fase gas. La sotto-cartella *constant* contiene alcuni file che descrivono i sotto-modelli fisici utilizzati ed importanti file riguardanti la griglia. La sotto-cartella *system* contiene gli stessi file introdotti per la movimentazione della griglia.

Ci soffermiamo ora sui file contenuti nella cartella *IVC* e sul relativo significato.

I campi da inizializzare sono:

- *alphat*: è la diffusività termica turbolenta. Deve essere inizializzata a zero nel dominio interno, mentre per le superfici di contorno si possono utilizzare diverse leggi di parete: Angelberger, Huh-Chang, Han-Reitz, Rakopolous ed altre. Fra queste è stata scelta la legge di parete di Huh-Chang.
- *k, epsilon*: energia cinetica turbolenta e tasso di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta. Il valore di queste grandezze nel dominio interno viene inizializzato ad un valore fisso, tramite l'utilizzo dello strumento *setEngineFlowAndSwirl*, che esegue una stima sulla base della velocità media del pistone e dell'alesaggio. Per le superfici di contorno è necessario usare delle apposite leggi di parete. Nelle simulazioni si è utilizzata la legge di parete compressibile::*epsilonWallFunction*.
- *soot, fv, cNp, rhosFv*: campi utilizzati dal modello per il calcolo del particolato prodotto. Il campo *soot* rappresenta la frazione massica del particolato, gli altri file sono richiesti dai modelli che è possibile utilizzare (Fusco, Hiroyasu, Moss, NagleStricklandConstable). Nelle simulazioni si utilizza il modello di Moss per il calcolo del particolato prodotto, usando come precursore del particolato l'acetilene ( $C_2H_2$ ). Questi valori vengono inizializzati a zero nel dominio interno, mentre sulle superfici di contorno viene imposta la condizione di gradiente nullo *zeroGradient*.
- *O2, N2, CO2, H2O*: frazioni massiche  $Y_i$  all'IVC. Il dominio interno viene inizializzato con i valori delle frazioni massiche delle specie, alle superfici di contorno viene imposta la condizione *zeroGradient*. Nel caso siano presenti altre specie è necessaria l'aggiunta di altri file, ad esempio nel caso HCCI sarà necessario aggiungere un file di nome *NC7H16* nel caso si utilizzi Eptano, di nome *NC12H26* nel caso si utilizzi Dodecano e così via.

- *Ydefault*: in questo file si inizializza la frazione massica di tutte le altre specie non descritte in un file dedicato. È solitamente utilizzato per inizializzare a zero le frazioni massiche delle specie appartenenti al meccanismo di reazione che non sono presenti all'IVC. Utilizza la condizione *zeroGradient* sulle superfici di contorno.
- *p*: pressione iniziale espressa in Pascal. Deve essere impostata ad un valore fisso nel dominio interno, con condizioni *zeroGradient* sulle superfici di contorno.
- *T*: temperatura iniziale espressa in Kelvin. Deve essere impostata ad un valore fisso nel dominio interno, mentre sulle pareti viene utilizzata la condizione *fixedValue*, che permette di esprimere un valore di temperatura a cui la parete si mantiene per la simulazione intera.
- *U*: campo di velocità iniziale. Si inizializza il dominio interno con lo strumento *setEngineFlowAndSwirl*, in accordo con il valore di intensità che viene dato al moto di Swirl, che deve essere specificato all'interno del file *engineGeometry*. Per le superfici di contorno invece è necessario specificare la condizione di velocità nulla sulle pareti fisse (*Liner*, *CylinderHead*), utilizzando *fixedValue* ed il vettore nullo (0 0 0), e la condizione *movingWallVelocity* sulle parete costituita dal pistone.
- *Z*: campo di distribuzione della grandezza frazione di miscela. Inizializzata a zero nel dominio interno (tranne in condizioni HCCI in cui si inizializza con il relativo valore di frazione di miscela), con condizione *zeroGradient* sulle superfici di contorno.
- *Zsat*: frazione di miscela in condizioni di saturazione. Da inizializzare a zero nel dominio interno, con condizione *zeroGradient* sulle superfici di contorno.
- *Z2*: varianza della frazione di miscela. Da inizializzare a zero nel dominio interno, con condizione *zeroGradient* sulle superfici di contorno.

Per quanto riguarda la cartella *constant*, si riporta la lista dei file contenuti ed una breve descrizione di quelli di maggiore interesse:

- *chemistryProperties*: dizionario per la chimica. Contiene le impostazioni per l'utilizzo del CCM, per la riduzione del meccanismo, per la tabulazione, le tolleranze per l'integratore della chimica ed altro.
- *combustionProperties*: dizionario per le proprietà della combustione.
- *dynamicMeshDict*: dizionario per la movimentazione della griglia.

- *engineCylinderDecomposition*: file generato durante la movimentazione e che riporta le informazioni per la divisione del dominio, necessarie per il calcolo parallelizzato.
- *engineGeometry*: dizionario che descrive aspetti operativi del motore, geometria ed informazioni importanti per la movimentazione della griglia.
- *environmentalProperties, g*: dizionari che riguardano aspetti ambientali, tra cui la forza di gravità.
- *injectorProperties*: dizionario che descrive l'iniezione del combustibile.
- *polyMesh*: cartella contenente la griglia al TDC.
- *RASProperties*: dizionario per la scelta del modello di turbolenza.
- *sprayProperties*: dizionario per la scelta dei modelli fisici utilizzati per simulare lo spray (atomizzazione, breakup, collisione, evaporazione, drag, scambio termico, ...).
- *thermophysicalProperties*: dizionario per le proprietà termo-fisiche della fase gas e della fase liquida, definizione del modello utilizzato per il calcolo del particolato.

Per i file su cui si è agito molto per lo svolgimento delle simulazioni di questo lavoro di tesi, si riportano le sezioni di codice di maggior interesse e si discutono brevemente.

**Dizionario chemistryProperties** Si è agito su questo file per cambiare le impostazioni del CCM e del meccanismo di riduzione. Di seguito si riporta la parte del file riguardante la divisione in zone operata dal CCM:

```
CCM                                on;

logMZ3                             on; //MZ3 = log(MZ3)
PaSRModel                          off;
kappaDefault                       kappaDefault [ 0 0 0 0 0 0 0 ] 1.0;
T_kappaDefault                    T_kappaDefault [ 0 0 0 1 0 0 0 ] 1300.0;
Cmix                               Cmix [ 0 0 0 0 0 0 0 ] 0.4082 ;
Cchi                               Cchi [ 0 0 0 0 0 0 0 ] 2.0 ;
SchZ2                              SchZ2 [ 0 0 0 0 0 0 0 ] .9 ;
Sct                                Sct [ 0 0 0 0 0 0 0 ] .9 ;
Prandtl                            Prandtl [ 0 0 0 0 0 0 0 ] 0.90 ;
ElmFrc_Element                    0;      //0 = H, 1 = C, 2 = O, N = 3
```

```

MZ3_MAX                1E9;    //Threshold for Z3 in phase space

Z1FieldToTabulate  progressEquivalenceRatio;

correctRRWithCH on;
correctRRWithElementConservation on;
correctRRWithDensity off;

logT off;

Z1zone_Span           0.05;
Z2zone_Span           5;
Z3zone_Span           1e15;

```

La parola chiave CCM viene utilizzata per abilitare o disabilitare la chimica multi-zona. In caso venga impostato su off, la risoluzione della chimica viene eseguita in ogni cella del dominio.

Il campo *Z1FieldToTabulate* serve per specificare quale grandezza Z1 utilizzare per la divisione in zone. Il solutore permette di scegliere una delle seguenti grandezze: *progressEquivalenceRatio*, *EquivalenceRatio*, *MixtureFraction*.

In questo lavoro di tesi si utilizza la tecnica di divisione in zone bi-dimensionale proposta da Babajimopolous, la scelta di Z1 ricade quindi sulla *progressEquivalenceRatio* e si disabilita la divisione in zone secondo il parametro Z3.

Con il campo *correctRRWithCH* si abilita o disabilita la correzione delle velocità di reazione secondo la regola *ch* (equazione 3.26).

Tramite il campo *correctRRWithElementConservation* si abilita o disabilita la conservazione degli elementi secondo le equazioni 3.27, 3.28 e 3.29.

Infine, il campo *correctRRWithDensity*, se attivato, consente di effettuare una correzione aggiuntiva alle velocità di reazione sulla base della densità delle celle. I valori dei campi *Z1zone\_Span*, *Z2zone\_Span* e *Z3zone\_Span* vengono utilizzati per definire l'accuratezza della divisione in zone. Essi costituiscono l'ampiezza delle zone secondo i parametri Z1, Z2 e Z3, rispettivamente. Per utilizzare una divisione in zone a due parametri,  $\varphi$  e  $T$ , si deve escludere l'effetto di Z3 impostando *Z3zone\_Span* ad un valore molto alto. Quanto più piccoli sono i valori di *Z1zone\_Span* e di *Z2zone\_Span*, quanto più alto sarà il numero di zone create e quanto più accurata la soluzione, accrescendo però lo sforzo computazionale. I valori consigliati per questi due parametri, sulla base dell'esperienza maturata durante il lavoro, sono di 0.01-0.05 per Z1 e di 2-10 per Z2.

La seguente parte di codice è invece quella relativa alla riduzione del meccanismo di reazione:

```
mechanismReduction
{

active on;

tolerance 0.001;

reductionMethod DRG; //metodi utilizzabili: DRG, DAC, DRGEP, PFA, EFA

initialSet

{
NC12H26;
CO;
CO2;
HO2;
H2O;
NO;
C2H2; //specie da utilizzare come precursore del particolato
}

...
...
...
}
```

Il campo *active* serve ad abilitare o disabilitare il metodo. Attraverso il campo *tolerance*, l'algoritmo di riduzione valuta il valore di soglia per cui le specie sono considerate attive oppure inattive. In *reductionMethod* è possibile effettuare la scelta del metodo di riduzione desiderato. Un campo di grande importanza è *initialSet*, già introdotto nel paragrafo 3.3.3, che specifica quali sono le specie da cui iniziare a valutare la forza dei legami. È necessario scrivere una lista che contenga le specie più importanti per la combustione e la produzione degli inquinanti. Si evidenzia la presenza delle specie *NO* e *C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>*, che sono il monossido di azoto e l'acetilene (utilizzato come precursore). Così facendo si evita che queste specie vengano disabilite dal metodo di riduzione, cosa che andrebbe ad influire sulla previsione degli inquinanti prodotti.

**Dizionario *thermophysicalProperties*** Di seguito si riporta la parti del file *thermophysicalProperties* su cui si è agito per condurre le simulazioni.

```
CHEMKINFile      "$FOAM_CASE/chemkin/sk54_tuned2_NOx.inp";

CHEMKINThermoFile "$FOAM_CASE/chemkin/thermo.dat";

inertSpecie      N2;

liquidComponents ( NC12H26 );

liquids
{
NC12H26
{
defaultCoeffs on;
}
}

sootModel Moss;

MossCoeffs
{

kA_a kA_a [0 0 0 0 0 0 0] 20.0;
... // altri coefficienti del modello di Moss

precursor C2H2;

sootOxModel FJ;
}
```

Il file *thermophysicalProperties* viene utilizzato per fornire al solutore il file del meccanismo di reazione utilizzato dall'integratore della chimica. Nel campo *CHEMKINFile* si deve specificare la posizione di tale file con rispetto alla cartella dove è contenuto il caso. Nel campo *CHEMKINThermoFile* si deve specificare la posizione del file contenente le proprietà termo-fisiche dei gas, quelli già presenti nel dominio all'istante iniziale e quelli che si formano in fasi intermedie della combustione. La parola che viene scritta nel campo *inertSpecie* serve ad indicare quella specie chimica per cui non verrà risolta l'equazione del trasporto, ma verrà

invece calcolata la frazione massica  $Y_{inerte}$  con l'equazione seguente:

$$Y_{inerte} = 1 - \sum_{i=1}^n Y_i \quad (4.1)$$

Con il campo *liquidComponents* si indica al solutore quale sarà il combustibile iniettato e quindi la specie che costituisce la fase liquida. In *liquids* si definiscono invece le proprietà termo-fisiche del liquido. Si ha la possibilità di utilizzare, a fini di studio, delle proprietà termo-fisiche relative ad un combustibile diverso da quello realmente iniettato. Questo permette di effettuare uno studio sul comportamento della combustione al variare delle proprietà termo-fisiche, lasciando inalterato il meccanismo di reazione che caratterizza il momento di accensione, e viceversa, utile per dividere gli effetti fisici da quelli chimici. Nel caso si voglia utilizzare delle proprietà termo-fisiche per il liquido diverso da quello effettivamente iniettato, è necessario riscrivere il sottodizionario *liquids* come segue:

```
liquids
{
NC12H26
{
defaultCoeffs off;
liquidSpecie .....;
}
}
```

ed inserire di fianco al campo *liquidSpecie* la specie desiderata.

Infine, la parte finale del file riguarda il modello utilizzato per il calcolo del particolato prodotto. Si sottolinea l'importanza della specie scelta come precursore per la formazione del particolato, da inserire nel sotto-dizionario *mossCoeffs*, nel campo *precursor*.

### 4.1.3 Processing e Post-Processing

**Avvio del caso** In questa sezione si spiega quali sono le operazioni che è necessario effettuare per preparare il caso alla fase di *Processing*. Si spiega successivamente come il solutore fornisce i risultati e come è possibile analizzarli.

Una volta effettuata la movimentazione della mesh ed il settaggio delle condizioni iniziali, è necessario seguire i seguenti passaggi:

1. Copiare il contenuto della cartella *IVC* in un'altra cartella, a cui si deve dare il valore dell'angolo di manovella dell'*IVC* (esempio: -145)



2. Inserire all'interno della cartella appena creata la griglia ottenuta dalla movimentazione, relativa all'istante corrispondente con l'IVC, insieme agli altri file generati (*engineCylinderDecomposition*, *meshPhi*, *processorIndexing*, *testProcessorIndexing*)
3. Ora che i file delle condizioni iniziali ed i file della griglia sono all'interno della stessa cartella, è necessario utilizzare il comando *setEngineFlowAndSwirl* per inizializzare il campo di velocità e le grandezze della turbolenza
4. Lanciare il comando *decomposePar*, necessario per creare le cartelle utilizzate dal calcolo parallelizzato. Verranno create delle cartelle di nome *processor0*, *processor1*, ..., in quantità pari al numero processori che si utilizzerà per il calcolo.

A questo punto il caso è pronto e può essere richiamato il solutore, il quale leggerà le condizioni iniziali contenute nelle cartelle create dallo strumento *decomposePar*, le impostazioni dei modelli fisici contenuti nella cartella *constant*, le proprietà dei gas ed il meccanismo di reazione contenuti in *chemkin* e le impostazioni numeriche definite nella cartella *system*.

Per comodità, nelle simulazioni di combustione tradizionale o PCCI in cui si comprime solo aria nella fase iniziale, si è soliti simulare la compressione in un caso separato da quello di combustione. La fase di compressione, in questi casi, non deve richiamare nessun modello fisico per la simulazione e non deve svolgere calcoli riguardanti la chimica e dipendenti dal meccanismo di reazione. Il risultato finale della simulazione della compressione è quindi indipendente dalle impostazioni contenute nei vari dizionari della cartella *constant*, su cui solitamente si agisce più volte prima di trovare un settaggio appropriato. Nella maggior parte dei casi quindi, si esegue la fase di compressione e si salvano i risultati ottenuti, si crea poi un nuovo caso per simulare la combustione, che userà come istante iniziale l'ultimo istante di tempo scritto durante la compressione.

Se dopo lo studio dei risultati di una simulazione di combustione, si presentasse la necessità di variare una impostazione qualunque riguardante la chimica, l'iniezione di combustibile, o le impostazioni numeriche, sarebbe possibile ripartire dall'ultimo istante scritto durante la compressione invece che dall'IVC, permettendo un notevole risparmio di tempo.

Per avviare il caso è necessario posizionarsi nella cartella superiore, che contiene il caso, e lanciare il seguente comando da terminal:

```
mpirun -np #np TDACCCMdieaselEngineDyMFoam -case #caso -parallel >& log
```

in cui il comando `>& log` permette di salvare l'output del solutore in un file.

**Studio dei risultati** Il solutore utilizzato crea diversi output di interesse:

- l'output della simulazione, salvabile in un file log
- le cartelle relative agli istanti computazionali scritti
- alcuni file generati dal codice del solutore

Il file log contiene tutte le informazioni date in output durante la simulazione, fra cui un riepilogo sulla griglia, sulle proprietà termo-fisiche selezionate, sulle specie chimiche contenute nel meccanismo di reazione e sull'iniezione di combustibile (pressione di iniezione e modelli per la simulazione dello spray). Per ogni istante computazionale viene riportato il numero di iterazioni richiesto, dalle equazioni del trasporto e dall'equazione della pressione, per arrivare a convergenza. Viene inoltre scritto lo stato del sistema: angolo di manovella, massa di gas, massa di liquido, numero di particelle liquide, volume, temperatura massima e minima, densità, . . . . Il file log viene utilizzato per identificare eventuali problemi numerici nella soluzione delle equazioni, oppure per ottenere delle informazioni che non vengono create come file in output dal solutore.

La seconda tipologia di output consiste in una serie di cartelle, automaticamente generate da OpenFOAM e divise su più processori in caso di calcolo parallelizzato, contenenti la distribuzione delle grandezze per gli istanti computazionali scritti. Nel caso di calcolo parallelizzato, il risultato relativo ad ogni istante computazionale risulta suddiviso fra le cartelle *processor*. Per ricostruire i risultati, in modo che ogni istante computazionale sia contenuto in una sola cartella, si utilizza il comando *reconstructTopoMesh*. Per visualizzare questi risultati si può utilizzare il software paraview, contenuto nelle parti terze dell'installazione di OpenFOAM. Questo tipo di software è utile per analizzare visivamente i campi di temperatura, velocità, concentrazione delle specie chimiche, e studiare punto di inizio e l'evoluzione della combustione.

L'ultima tipologia di output è invece generata dal codice del solutore, il quale calcola alcune grandezze medie e alcune grandezze integrali nel dominio, scrivendone il risultato in file appositi. Questi file vengono compilati durante l'esecuzione della simulazione, per ogni istante computazionale calcolato viene aggiunta una nuova riga. Ecco alcuni dei file generati:

- *p.Cyl*: profilo di pressione media nel cilindro, espressa in Pascal [Pa]
- *t.Cyl*: profilo di temperatura media nel cilindro, espressa in Kelvin [K]
- *RoHR.Cyl*: tasso di rilascio del calore istantaneo relativo all'intero cilindro, espresso in Joule su grado di rotazione della manovella [J/deg]
- *cumRoHR.Cyl*: valori cumulativi del calore rilasciato dall'inizio della simulazione, espresso in Joule [J]

- *heat.Cyl*: file multi-colonna che riporta il calore scambiato singolarmente attraverso il pistone, il cilindro e la testa, espresso in Joule su grado di rotazione della manovella [J/deg]
- *totHeat.Cyl*: calore scambiato attraverso tutta la superficie del motore, ottenuto sommando i valori delle colonne di *heat.Cyl*, espresso in [J/deg]
- *massBal.Cyl*: massa contenuta nel settore che rappresenta la griglia, espressa in chilogrammi [kg]
- *vol.Cyl*: volume del settore che rappresenta la griglia, espresso in metri cubi [ $m^3$ ]
- *pollNO.Cyl*: frazione molare degli ossidi di azoto
- *pollCO.Cyl*: frazione molare del monossido di carbonio
- *pollCO2.Cyl*: frazione molare di anidride carbonica
- *sootAv.Cyl*: concentrazione di particolato espressa in chilogrammi su metro cubo [ $kg/m^3$ ]

Più avanti si utilizzeranno questi file per confrontare diversi motori o diverse condizioni operative dello stesso motore. Saranno utili per confrontare i profili di pressione e di rilascio del calore, e la produzione di inquinanti.

Altri file di grande interesse sono i file *ZTdistribution*, contenenti tutti i valori di frazione di miscela  $Z$  e di temperatura  $T$  relativi alle zone create dal CCM, ad ogni istante computazionale. Visualizzando la dispersione dei punti in un piano  $Z$ - $T$ , con software dedicati alla visualizzazione di dati, si ha la possibilità di comprendere il processo di formazione della miscela istante per istante, durante e dopo l'evento di iniezione del combustibile. Questi file forniscono inoltre delle informazioni molto interessanti sull'avvio e sullo sviluppo della combustione, ad esempio permette di capire qual'è il valore di  $Z$  relativo alle zone che auto-accendono prima, e quale valore di  $Z$  provoca fiamme a temperatura più alta. In figura 4.3 viene riportata la distribuzione di  $Z$  e  $T$  creata dall'algoritmo CCM in un motore PCCI in 4 momenti diversi, a -20 CA (formazione della miscela), a -15 CA (prime reazioni di ossidazione a bassa temperatura), a -10 e -5 CA (rilascio principale del calore).

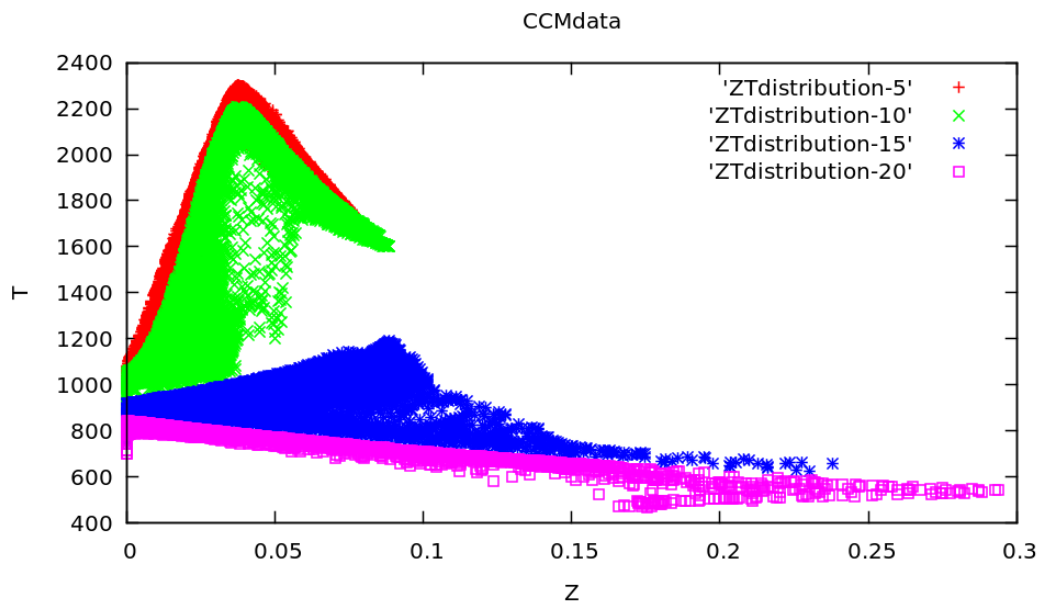


Figura 4.3: Distribuzione ZT in un motore PCCI, a diversi angoli di manovella

## 4.2 Il motore CFR

Per iniziare la parte operativa di questo lavoro di tesi, si è scelto di lavorare con il motore CFR (*Cooperative Fuel Research Engine*). L'obiettivo prefissato era quello di prendere confidenza con gli strumenti necessari, quindi con i metodi di riduzione del tempo di calcolo introdotti al capitolo 3, le procedure per la movimentazione della griglia e per l'inizializzazione dei casi, ed infine con gli strumenti per il *post-processing*.

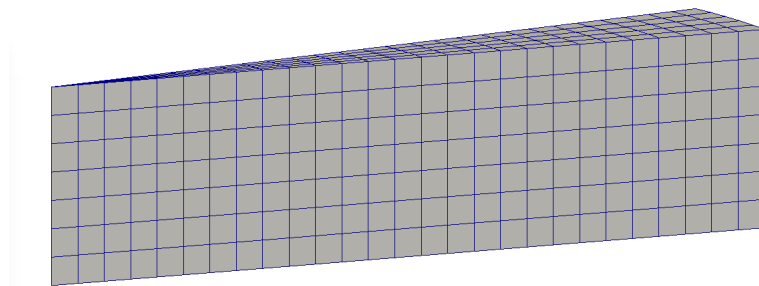


Figura 4.4: Griglia del motore CFR

Il motore CFR è caratterizzato da una geometria molto semplice. La griglia con cui si simula il funzionamento di questo motore, visibile in figura 4.4, rappresenta

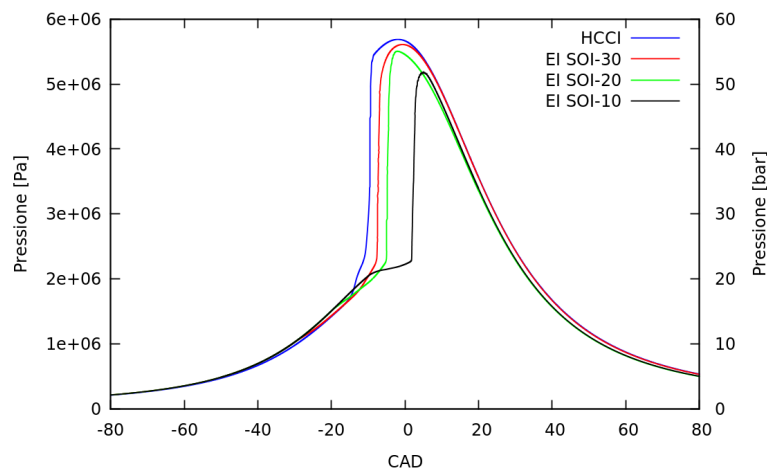


Figura 4.5: Profili di pressione ottenuti in modalità HCCI e PCCI (CFR)

un settore pari ad  $1/36$  del dominio complessivo. Essendo costituita da un basso numero di celle lo sforzo computazionale per svolgere le simulazioni è ridotto. Si è provato a condurre le prime simulazioni di combustione LTC (HCCI e PCCI), che hanno dato delle indicazioni utili sul fenomeno dell'auto-accensione. Come combustibile si è scelto il normal-Eptano, idrocarburo paraffinico relativamente semplice la cui accensione avviene secondo il meccanismo della *two stage ignition*, come descritto nel paragrafo 1.4.1.

La condizione operativa testata è la seguente:

- $n = 700$  [rpm]
- $p_{IVC} = 0.93$  [bar]
- $T_{IVC} = 375$  [K]
- $\lambda \simeq 2.2$

La frazione massica dei gas di ricircolo ( $CO_2$  e  $H_2O$ ) è stata inizializzata a zero, così da simulare una condizione di funzionamento a EGR nullo.

In figura 4.5 si può apprezzare il profilo di pressione ottenuto in una simulazione HCCI, e confrontarlo con quello ottenuto in tre diverse simulazioni PCCI, caratterizzate da un valore diverso di inizio dell'iniezione (SOI). Come si è già detto, nelle combustioni HCCI il combustibile è già premiscelato con il comburente all'inizio della fase di compressione, quindi questo auto-accenderà nel momento in cui si verificano le condizioni termo-fisiche opportune. Pertanto, all'inizio della fase di compressione di una miscela omogenea e premiscelata, non si ha più possibilità di controllare il processo. Per variare il momento di accensione in una combustione HCCI è necessario intervenire prima dell'inizio della compressione, variando le

condizioni all'IVC: temperatura, pressione, grado di ricircolo, . . .

La modalità PCCI fornisce invece una possibilità di controllo del momento di accensione molto più semplice, variando il momento in cui il sistema di controllo invia il segnale di apertura dell'iniettore.

È possibile notare che in condizioni HCCI l'accensione della carica avviene all'incirca all'istante -15 CAD; utilizzando queste condizioni all'IVC non c'è possibilità di far avvenire la combustione in un istante differente. In modalità PCCI si è provato ad iniettare combustibile in tre istanti diversi: -30 CAD, -20 CAD e -10 CAD. I risultati hanno mostrato che ritardando l'iniezione è possibile controllare il momento di auto-accensione. Quindi, variare l'istante in cui comincia l'iniezione di combustibile (SOI), si è dimostrata essere una possibile strategia per il controllo della combustione nei motori PCCI. Si specifica che la conclusione ottenuta per questo motore, potrebbe non valere per altri motori funzionanti in diverse condizioni operative e con un altro combustibile. Si analizzano ora i risultati ottenuti in termini di produzione di inquinanti. In figura 4.6 si effettua il confronto della concentrazione degli ossidi di azoto (in ppm), da cui è possibile ricostruire la modalità in cui la combustione è avvenuta. È possibile notare che i risultati ottenuti sono significativamente diversi l'uno dall'altro. Il valore finale di concentrazione degli ossidi di azoto è strettamente legato al tipo di combustione che si è verificata. Una carica omogenea infatti non può generare picchi locali di temperatura, condizione necessaria la produzione di  $NO_x$ . Viceversa, quando si tratta una carica non omogenea, si possono avere sia zone ricche che magre, unitamente a temperature elevate. Le zone in cui si produce la maggior parte degli ossidi di azoto sono in genere porzioni della miscela che presentano una certa disomogeneità. Proprio all'interfaccia fra una zona ricca ed una magra, si creano le condizioni che favoriscono la produzione di questo inquinante, ovvero alte temperature ed alta concentrazione di ossigeno. In modalità HCCI la produzione di questo inquinante è fortemente limitata, questo è dovuto all'utilizzo di una miscela omogenea molto magra. In caso non si adoperi un ricircolo di gas combusti, come in questo caso, la concentrazione di ossigeno sarà sicuramente elevata, favorendo la produzione di  $NO_x$ . Tuttavia, la quantità effettivamente prodotta sarà bassa se le temperature rimangono limitate. In modalità PCCI si creano di solito condizioni più favorevoli alla produzione di questo inquinante, proprio per la tipologia di carica che questo motore utilizza, che può presentare localmente alte temperature ed alta concentrazione di ossigeno.

Studiando come varia il valore finale della produzione di  $NO_x$  nelle combustioni PCCI di figura 4.6, si nota che la produzione è inferiore iniettando in ritardo. Questo particolare comportamento è dovuto principalmente alle inferiori temperature raggiunte in seguito ad una accensione ritardata. Per quanto riguarda invece le emissioni di monossido di carbonio, si può notare come il grande eccesso di aria utilizzato permetta di avere emissioni praticamente nulle di questo inquinante (fi-

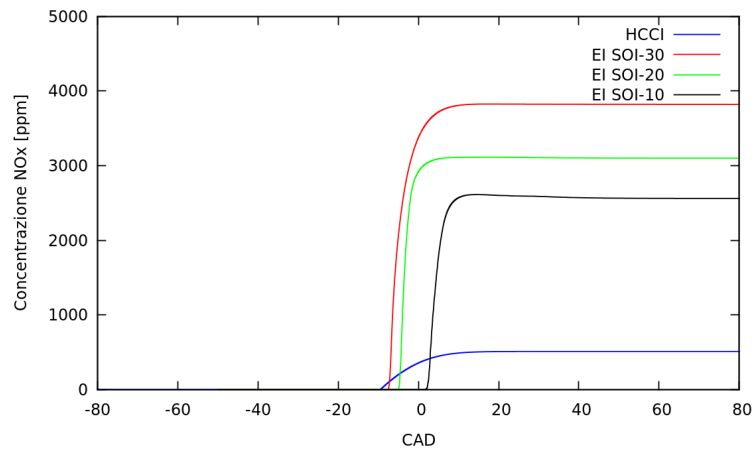


Figura 4.6: Concentrazione degli ossidi di azoto (CFR)

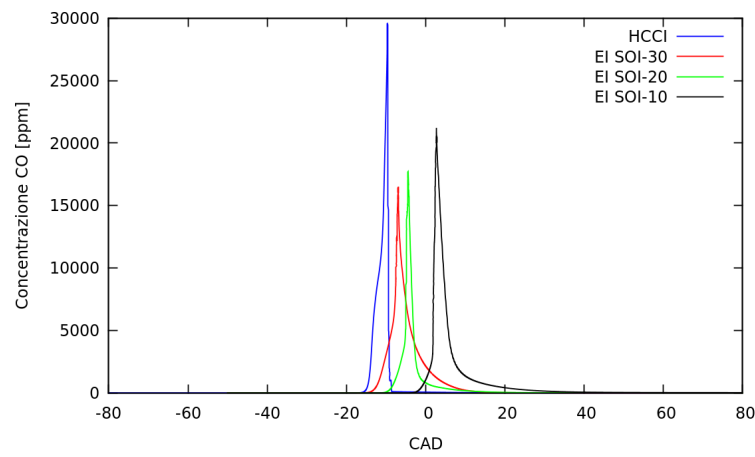


Figura 4.7: Concentrazione del monossido di carbonio (CFR)

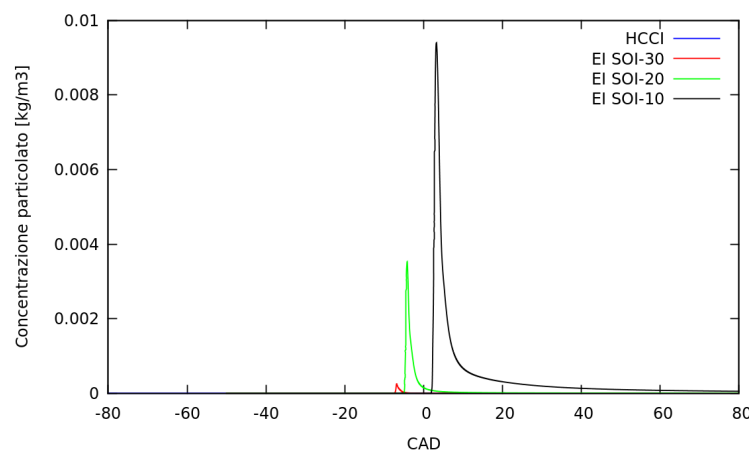


Figura 4.8: Concentrazione di particolato (CFR)

gura 4.7). Interessante notare come sia la modalità HCCI a creare il picco più alto di  $CO$  prodotto, e come questo sia distrutto in pochissimo tempo. Questo comportamento può essere spiegato dalla modalità in cui avviene l'ossidazione nei motori HCCI; infatti, in condizioni di temperatura e rapporto di equivalenza uniformi, le reazioni procedono alla stessa maniera in tutto il dominio. Pertanto, la produzione del  $CO$  avviene simultaneamente in ogni parte del cilindro, così come la sua distruzione. L'ultimo confronto che si vuole fare riguarda il particolato prodotto nelle diverse tipologie di combustione (4.8). È possibile notare come la modalità HCCI non produca la minima quantità di particolato grazie alla perfetta omogeneità della carica. Nelle simulazioni PCCI invece si riscontra che la produzione di questo inquinante è tanto più alta quanto inferiore sia il tempo per il miscelamento. Pertanto, quanto più ritardata sia l'iniezione, quanto più saranno presenti zone ricche di combustibile al momento di inizio della combustione. Queste zone, per colpa delle alte temperature generate durante il processo e la locale scarsità di ossigeno, saranno le responsabili della produzione di particolato.

Il confronto effettuato ci ha permesso di comprendere in parte il comportamento delle combustioni HCCI e PCCI. Si è concluso che la combustione PCCI potrebbe offrire una modalità di regolazione semplice, potendo variare la dinamica dell'accensione cambiando l'istante in cui si inietta il combustibile. Si è inoltre dimostrato che la combustione HCCI, a pari condizioni di pressione e temperatura all'IVC, consente una minore produzione di inquinanti grazie all'elevato grado di diluizione che la caratterizza.



## Capitolo 5

### I motori F1C ed F1A

Dopo ad aver condotto con successo le prime simulazioni di combustioni LTC, si è dovuta verificare l'affidabilità dello strumento CFD utilizzato. Come descritto al capitolo 3 infatti, per descrivere un fenomeno complesso come quello della combustione in un MCI, è necessario fare riferimento a molti sotto-modelli fisici, oltre che ad altri strumenti software necessari alla simulazione del problema. Questo porta ad aumentare il grado di incertezza relativo ai risultati, considerando che l'eventuale inaccuratezza di tali strumenti si andrebbe a sommare ai problemi numerici di base a cui ogni simulazione CFD è soggetta. Per verificare l'affidabilità di un modello è pertanto necessario un riscontro sperimentale.

In questo capitolo si utilizza il solutore della chimica dettagliata per riprodurre il funzionamento di due diversi motori, un motore Diesel tradizionale ed un motore PCCI. Per questi motori, progettati da Fiat Powertrain Technologies (FPT), si conoscono le rispettive geometrie e condizioni operative, si dispone inoltre delle rilevazioni sperimentali utili per la validazione del solutore CFD. Il combustibile utilizzato per queste prove sperimentali è il gasolio commerciale. Per la simulazione CFD di queste combustioni si è deciso di utilizzare il normal-Dodecano, il quale è caratterizzato da valori del ritardo di accensione molto simili a quelli del gasolio commerciale, e proprietà termo-fisiche similari. Il buon livello di accordo riscontrato ha permesso di ritenere affidabile lo strumento CFD utilizzato.

I risultati ottenuti verranno confrontati con quelli di un altro solutore ampiamente utilizzato, al fine di sottolineare l'importanza della chimica dettagliata per descrivere propriamente alcuni fenomeni.

#### 5.1 Simulazione di combustione Diesel tradizionale nel motore F1C

Il primo problema che si è affrontato è la simulazione di combustione in un motore Diesel tradizionale. Nella LibICE è presente un altro solutore ampiamente utilizzato per questa tipologia di combustione, il CTCEngineDyMFoamSootNOx. Tale

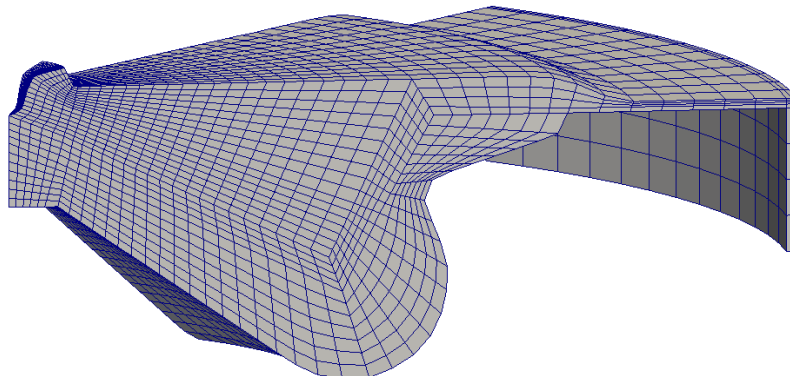


Figura 5.1: Griglia utilizzata per simulare il motore F1C

codice, utilizza alcuni strumenti in comune con il solutore TDACCCMdieSELEngi-neDyMfoam, tra cui i sotto-modelli di simulazione dello spray e gli algoritmi per la movimentazione della griglia. Per comodità, da qui in avanti ci si riferirà a questi due solutori con le sigle CTC e CCM. La differenza principale fra i due solutori risiede nel modo di affrontare la chimica, attraverso l'utilizzo del *Characteristic Time Scale Model* per il CTC, e del modello *well-mixed* per il CCM. Il modello CTC, nonostante non preveda la soluzione della cinetica chimica dettagliata, restituisce risultati confrontabili con quelli ottenuti nella realtà. Tale modello può rivelarsi però del tutto inaffidabile in quei casi in cui è necessario affrontare adeguatamente la cinetica chimica (auto-accensione, produzione di inquinanti, ...). È utile pertanto effettuare un confronto fra i dati sperimentali ed i risultati ottenuti da ciascuno dei due solutori, al fine di valutare le rispettive prestazioni.

### 5.1.1 Condizione operativa e dati sperimentali

Il motore F1C è un motore Diesel tradizionale, caratterizzato da un rapporto di compressione pari a 17.75, per il quale si conoscono le rilevazioni sperimentali di diversi parametri di interesse: pressione, temperatura, tasso di rilascio del calore apparente, portate massiche in ingresso ed in uscita, ...

La griglia utilizzata per le simulazioni è riportata in figura 5.1, e si presenta come un settore pari a 1/8 del volume interno del motore. Le celle della griglia sono orientate nella stessa direzione dello spray di combustibile (*spray-oriented*). La strategia di iniezione adottata sperimentalmente consiste nell'immissione di gasolio ad alta pressione, divisa in tre fasi: iniezione pilota a -12.4 CAD, pre-iniezione a -6.9 CAD ed iniezione principale a -1.4 CAD. La condizione operativa studiata sperimentalmente è la seguente:

- IVC = -145 CAD, EVO= 110 CAD

- $n = 2000$  [rpm]
- $BMEP = 13.5$  [bar]
- $p_{IVC} = 2.03$  [bar]
- $T_{IVC} = 369$  [K]
- $EGR \simeq 16\%$
- $\lambda = 1.4$

Si tratta di una condizione operativa relativa ad un carico medio-alto. Il primo passo per eseguire a computer la simulazione di un caso già studiato sperimentalmente, è la definizione delle condizioni iniziali. Infatti, nella maggior parte dei casi, non è possibile utilizzare i dati sperimentali relativi all'inizio della compressione, in quanto soggetti a variazione ciclica e ad incertezze di misura. Per ottenere un profilo di pressione confrontabile con quello ottenuto sperimentalmente, è necessario eliminare questa fonte di incertezza prima della simulazione numerica del caso. Attraverso l'utilizzo di un modello termodinamico implementato in un foglio di calcolo, si sono ottenute le particolari condizioni ( $Y_i, p, T$ ) da utilizzare per l'impostazione del caso in OpenFOAM, che permettono di ottenere lo stesso profilo di pressione riscontrato sperimentalmente. Questo serve a garantire che si arrivi a condizioni di pressione e temperatura al SOI molto simili, e che siano rispettati i valori di  $\lambda_{globale}$  e della massa intrappolata nel cilindro. Solo in questo modo la simulazione della combustione potrà dare una previsione di reale interesse pratico. L'utilizzo del modello termodinamico ha generato le seguenti condizioni:

- $p_{IVC}^{F1C} = 2.07$  [bar]
- $T_{IVC}^{F1C} = 381$  [K]
- $Y_{O_2}^{F1C} = 0.2058, Y_{CO_2}^{F1C} = 0.0267, Y_{H_2O}^{F1C} = 0.0141, Y_{N_2}^{F1C} = 0.7534$

che sono state inserite all'interno dei rispettivi file  $p$ ,  $T$ ,  $O_2$ ,  $CO_2$ ,  $H_2O$  ed  $N_2$  contenuti nella cartella IVC del caso. È stata simulata poi la fase di compressione, che ha mostrato un ottimo livello di accordo fra la curva di pressione sperimentale e quella ottenuta nel file  $p.Cyl$ , generato dal solutore. Come spiegato nel capitolo 4 nella sezione riguardante la preparazione di un caso, la simulazione della fase di compressione può essere eseguita una volta sola, utilizzando il suo risultato finale per inizializzare diverse simulazioni di combustione. Dovendo simulare la prima iniezione di combustibile a -12.4 CAD, la simulazione della compressione è stata svolta imponendo come istante di inizio -145 CAD (IVC) e -15 CAD come istante finale (valore che risulta comodo per l'inizializzazione del caso di combustione).

Simulando quindi la fase di compressione si sono ottenute le cartelle *processor* relative all'istante -15 CAD, contenenti i file che descrivono in ogni cella del dominio le condizioni ( $Y_i, p, T$ ) ed il valore delle grandezze della turbolenza ( $\alpha_t, \mu_t, k, \varepsilon$ ). Utilizzando queste cartelle sono stati creati due casi di combustione, uno da svolgere con il solutore CTC ed uno con il solutore CCM.

### 5.1.2 Discussione dei risultati

In figura 5.2 si confrontano i profili di pressione ottenuti dalle simulazioni, con il solutore CTC e con il solutore CCM, con il profilo di pressione sperimentale. Come è possibile notare, il solutore CCM riesce a replicare meglio il profilo di pressione sperimentale rispetto al solutore CTC. Questo è indubbiamente dovuto ad una migliore capacità di prevedere la corretta velocità delle reazioni di ossidazione, grazie all'utilizzo della cinetica chimica dettagliata. Si può quindi confermare che il solutore CCM sia affidabile nella previsione del profilo di pressione di un motore Diesel tradizionale. Si è effettuato anche un confronto sul tasso di rilascio del calore, visibile in figura 5.3. Il dato sperimentale di rilascio del calore è una grandezza derivata e non misurata, data la difficoltà di ottenere tale tipo di misura sperimentalmente. L'AHRR (*Apparent Heat Release Rate*) sperimentale, rappresenta quindi solo una stima del tasso di rilascio del calore, basato sull'evoluzione della pressione e del volume del cilindro. Visualizzando tale grandezza in un grafico, quello che si ottiene è una linea dalla forma molto regolare, apprezzabile in figura 5.3. I file *RoHR.Cyl*, ottenuti dai solutori CTC e CCM, forniscono invece una indicazione del tasso di rilascio del calore, calcolato in base alle condizioni termo-chimiche della miscela istante per istante. Tale valore presenta pertanto una maggiore variabilità. Ancora una volta si può apprezzare come il risultato offerto dal solutore CTC mostri qualche differenza rispetto all'indicazione data dall'AHRR, che trova invece sufficiente accordo con l'andamento del tasso di rilascio del calore calcolato dal solutore CCM, soprattutto per quanto riguarda il momento di auto-accensione ed il calore rilasciato dall'iniezione pilota e dalla pre-iniezione. Al paragrafo 1.3, si è descritta la forma tipica della curva di rilascio del calore di un motore Diesel, visibile in figura 1.5. In tale figura si poteva vedere un picco di rilascio del calore molto marcato, relativo alla fase premiscelata della combustione. Questo comportamento è appena visibile nel motore F1C, per effetto delle iniezioni pilota che riscaldano la camera di combustione. Di conseguenza il ritardo d'accensione sarà considerevolmente ridotto, e la frazione di combustibile che brucia in fase premiscelata sarà molto inferiore rispetto al caso con iniezione singola. Questa strategia viene adottata nei motori Diesel recenti per ridurre il rumore di combustione.

Per quanto riguarda invece la produzione di inquinanti, di cui purtroppo non si dispone di rilevazioni sperimentali, si può notare come la previsione fatta dai due

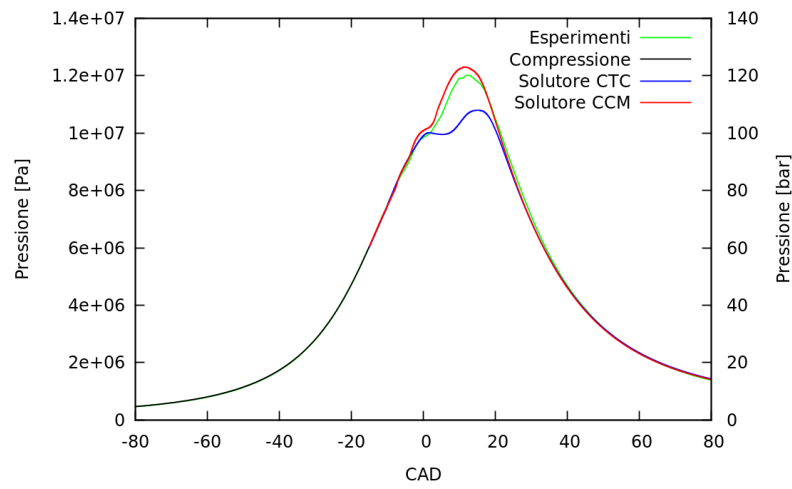


Figura 5.2: Confronto del profilo di pressione sperimentale con quello ottenuto dai solutori CTC e CCM (F1C)

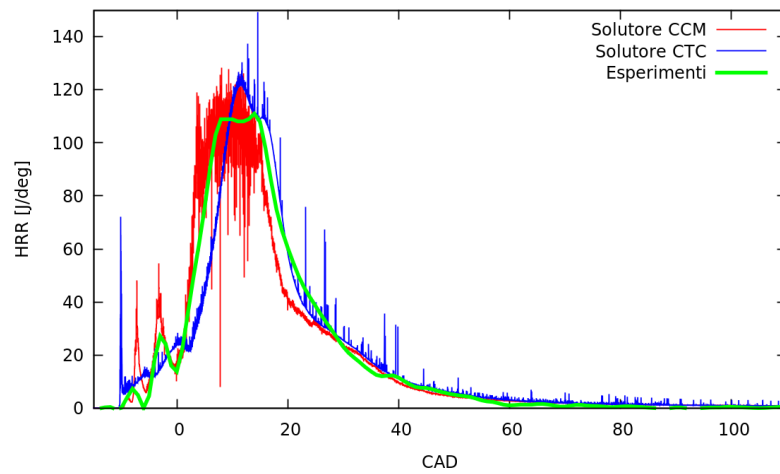


Figura 5.3: Confronto del tasso di rilascio di calore sperimentale con quello ottenuto dai solutori CTC e CCM (F1C)

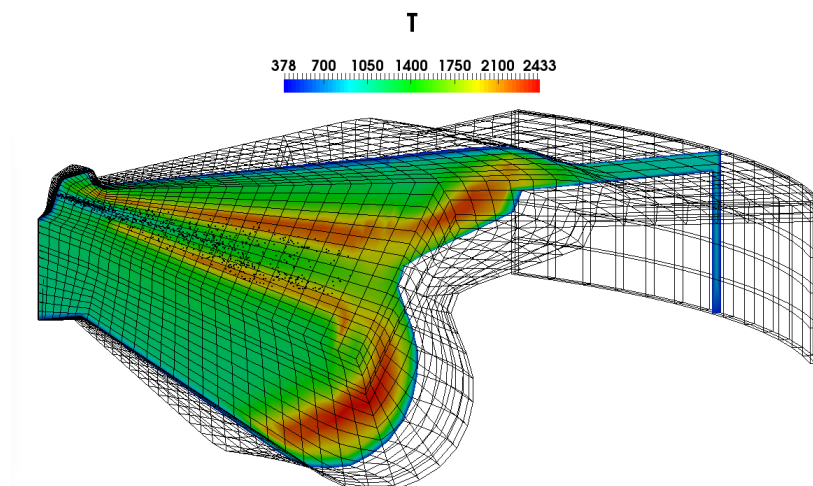


Figura 5.4: Combustione ottenuta nel motore F1C

solutori sia molto diversa. Fra le soluzioni ottenute, quella con maggior livello di affidabilità è sicuramente quella ottenuta dal solutore CCM, in quanto frutto di un approccio dettagliato alla chimica e non di una sua modellazione. Se per gli  $NO_x$  e per il  $CO$  la previsione fatta dal solutore CTC è comunque buona (fig. 5.5 e 5.6), sia nel valore di picco che nel valore finale, si può notare che per quanto riguarda il particolato il discorso è diverso. Per ottenere una previsione affidabile della velocità di produzione del particolato, è necessario descrivere la chimica attraverso un meccanismo di reazione dettagliato. Senza una ricostruzione accurata dell'evoluzione delle specie chimiche durante il processo, non è possibile caratterizzare in maniera corretta il processo di formazione di tale inquinante (fig. 5.7).

Terminato il confronto fra il solutore CTC ed il solutore CCM, si volge uno sguardo ai risultati ottenuti ed alle caratteristiche della combustione. Nel grafico di figura 5.8 sono riportate due diverse grandezze che è utile analizzare, al fine di caratterizzare il tipo di fiamma che si instaura nel sistema. In blu è riportata la massa di combustibile liquido presente nel sistema. Questa informazione è stata estrapolata dal file log generato durante la simulazione, pertanto si riferisce al solo dominio computazionale (1/8 del volume del motore). L'altra grandezza è ancora una volta il tasso di rilascio di calore istantaneo, ottenuto dal file *RoHR.Cyl* generato dal solutore. Sovrapporre queste due grandezze nello stesso grafico serve ad accorgersi dell'eventuale presenza contemporanea di liquido e di fiamme, situazione che, come descritto nel capitolo 1, porta ad avere fiamme di tipo diffusivo attorno alle goccioline di combustibile, e conseguentemente una combustione di tipo "mixing-controlled" caratterizzata da elevate produzioni di  $NO_x$  e particolato. Nei motori PCCI si vuole evitare una condizione di questo tipo, al fine di contenere efficacemente la produzione di inquinanti. Grafici di questo tipo verranno analizzati per ogni tipo di motore PCCI introdotto, al fine di assicurarsi che non ci sia sovrapposizione delle curve di liquido e del calore, così che gran parte del combustibile riesca a bruciare in forma premiscelata.

Si passa infine all'analisi dei file *ZTdistribution* creati dall'algoritmo CCM, i quali permettono di visualizzare in una maniera intuitiva le informazioni riguardanti la ricchezza e la temperatura della miscela, in diversi istanti durante il processo di combustione. La figura 5.9 riporta la distribuzione Z-T in diversi istanti di interesse della fase iniziale del processo di combustione:

- *ZTdistribution-11* (-11 CAD): la distribuzione Z-T relativa a questo istante permette di apprezzare il processo di formazione della miscela in seguito all'evento di iniezione, in questo caso poco dopo l'iniezione pilota. La nuvola di punti assume la forma di una striscia stretta e lunga, caratterizzata da temperature più basse quanto più alto sia il valore di frazione di miscela. Questo comportamento è dovuto all'interazione dei gas con il combustibile liquido, il quale evaporando sottrae calore sensibile alla massa di gas circo-

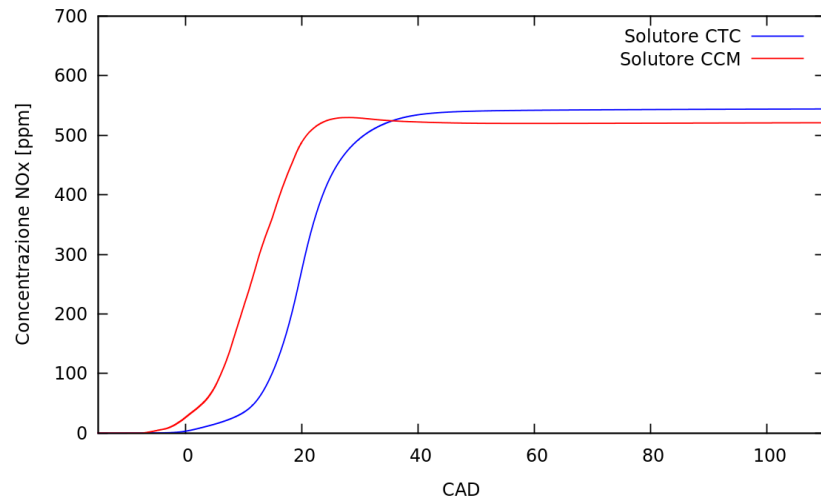


Figura 5.5: Concentrazione degli ossidi di azoto (F1C)

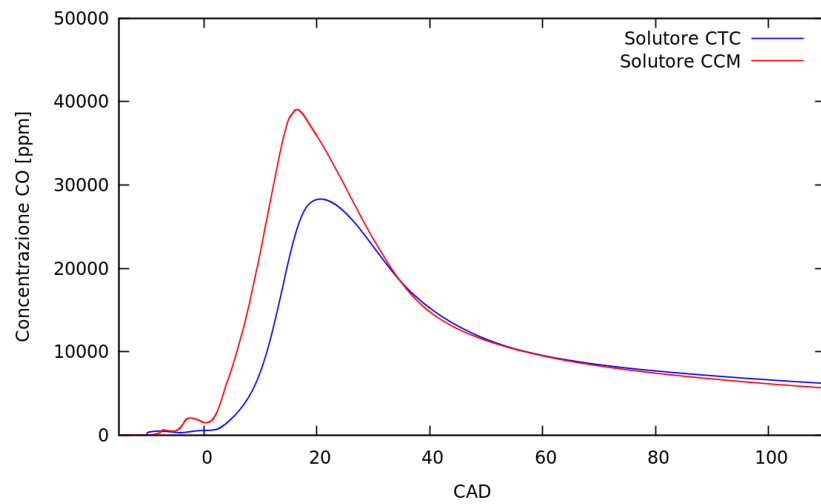


Figura 5.6: Concentrazione del monossido di carbonio (F1C)

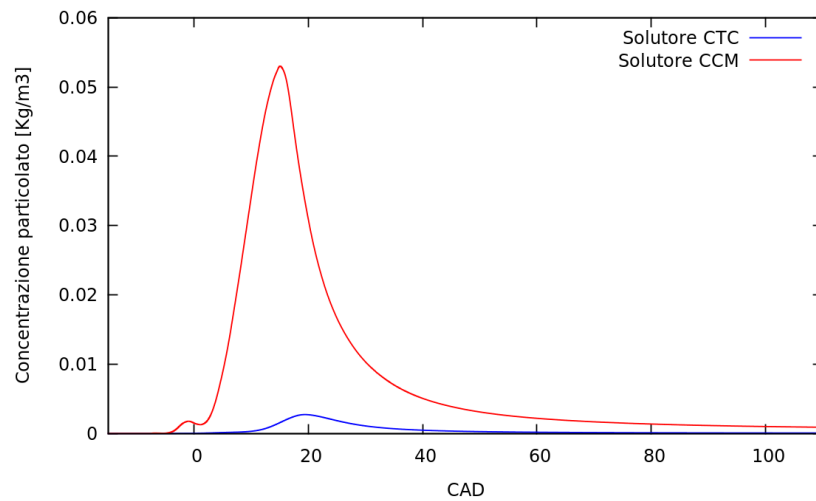


Figura 5.7: Concentrazione del particolato (F1C)

stante, in misura legata al proprio calore latente di evaporazione. Le zone a più alto valore di frazione di miscela sono pertanto le più fredde.

- ZTdistribution-8 (-8 CAD): questo è l'istante in cui è possibile apprezzare l'inizio delle reazioni di ossidazione. La nuvola dei punti si trova ad un livello di temperatura mediamente più alto rispetto a quella dell'istante -11 CAD, in parte per il procedere della compressione ed in parte per il calore rilasciato in alcune zone. È possibile notare infatti un lieve ripiegamento verso l'alto della nuvola di punti che genera un punto di massimo, segno che in qualche zona del dominio la cinetica chimica delle reazioni di ossidazione è favorita, comportando un rilascio locale di calore ed un conseguente innalzamento della temperatura. Queste zone sono solitamente caratterizzate da un valore di Z superiore a quello stechiometrico, e sono pertanto zone ricche di combustibile.
- ZTdistribution-6 (-6 CAD): in questo istante si può notare un notevole innalzamento delle temperature, segno che è avvenuta l'auto-accensione del combustibile iniettato durante l'iniezione pilota. Il picco di temperatura assunto dalla nuvola di punti non si trova più nella parte del grafico relativa alle zone ricche, si trova invece esattamente in condizioni di miscela stechiometrica.

Il valore di Z per una miscela stechiometrica si può calcolare come segue [33]:

$$Z_s = \left[ \frac{1}{1 + \frac{Y_f W_{O_2} \nu_{O_2}}{Y_{O_2} W_f \nu_f}} \right] \quad (5.1)$$

dove  $Y_f$  è la frazione massica di combustibile nel flusso che lo trasporta (pari a 1 se il flusso è combustibile puro),  $Y_{O_2}$  è la frazione massica di ossigeno nel flusso di ossidante (nel nostro caso  $Y_{O_2}^{F1C} = 0.2058$ ),  $\nu_f$  e  $\nu_{O_2}$  sono i coefficienti stechiometrici del combustibile e dell'ossigeno nella relativa reazione di ossidazione.  $W_f$  e  $W_{O_2}$  infine sono le masse molecolari del combustibile e dell'ossigeno. Facendo riferimento all'equazione 1.1, con  $x = 12$  ed  $y = 26$  per il dodecano, si assume  $\nu_f = 1$  e  $\nu_{O_2} = (x + \frac{y}{4}) = 18.5$ . Utilizzando  $W_f = W_{C_{12}H_{26}} = 170.34$  e  $W_{O_2} = 31.988$  e facendo il calcolo si ottiene:

$$Z_s^{F1C} \simeq 0.056$$

che è il punto di ascissa in corrispondenza del picco massimo di temperatura nel grafico di figura 5.9.

In figura 5.10 vengono rappresentate invece le distribuzioni Z-T all'istante 0 CAD, in cui si ha simultaneamente iniezione e combustione, all'istante 20 CAD, in cui l'iniezione è già terminata ma la combustione procede in maniera diffusiva, ed



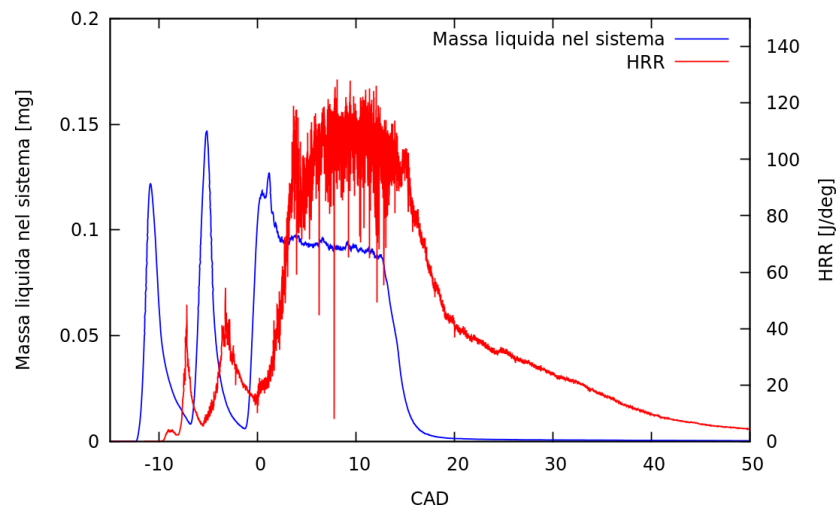


Figura 5.8: Presenza di liquido e HRR (F1C)

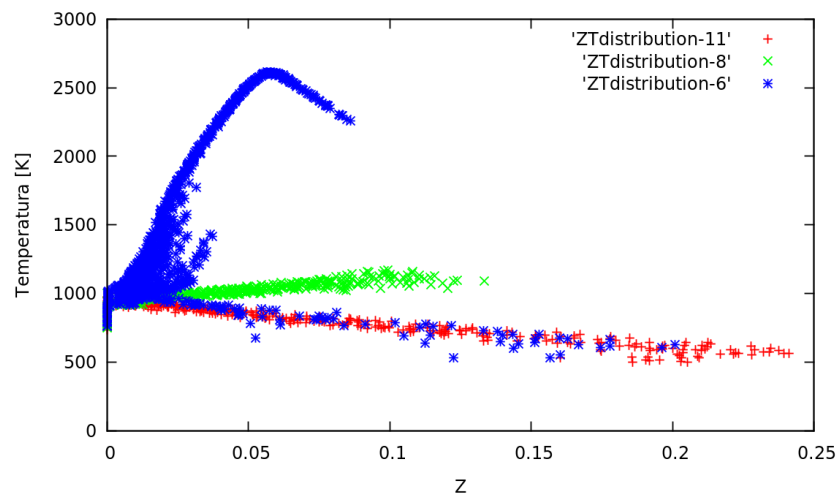


Figura 5.9: Distribuzione Z-T nelle prime fasi (F1C)

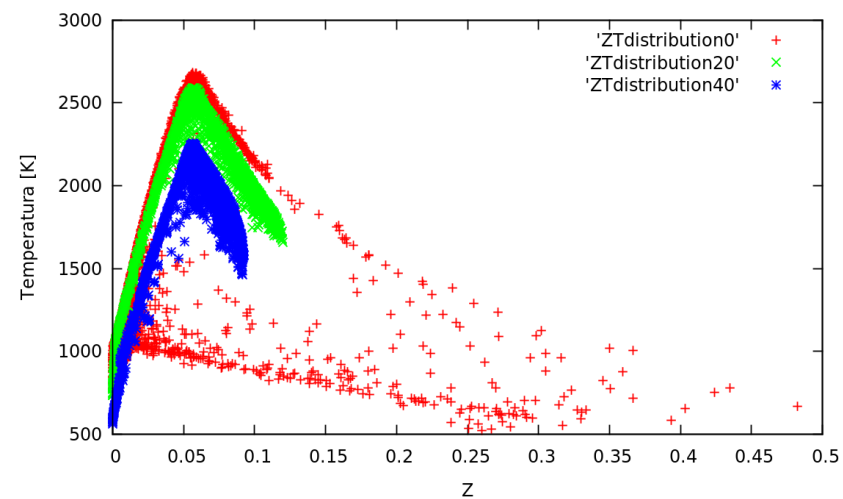


Figura 5.10: Distribuzione Z-T durante la combustione (F1C)

all'istante 40 CAD, in cui il tasso di rilascio del calore si avvicina allo zero e le temperature scendono rapidamente, per effetto dell'espansione provocata dalla discesa del pistone.

## 5.2 Simulazione di combustione PCCI nel motore F1A

Si introduce ora il primo motore funzionante in modalità PCCI. Mentre per la modalità di combustione Diesel tradizionale sono disponibili diversi solutori per la simulazione a computer del processo, per la modalità PCCI l'unico modo per ottenere dei risultati indicativi è quello di utilizzare solutori che risolvono la chimica dettagliata delle reazioni di ossidazione. In questo paragrafo infatti si dimostrerà che il solutore CTC non è in grado di prevedere il momento di autoaccensione di una carica premiscelata. Si discuteranno quindi i risultati ottenuti dalla simulazione con il solutore CCM, e si evidenzieranno le peculiarità della combustione PCCI conducendo un'analisi simile a quella fatta per il motore F1C. Si evidenzierà poi la differenza nei risultati indotta dall'utilizzo di un meccanismo di reazione ridotto. Infine si discuterà dell'influenza del valore  $Z_{1zone\_Span}$  sull'evoluzione delle specie chimiche nel regime NTC, descritto al paragrafo 1.4.1.

### 5.2.1 Condizione operativa e dati sperimentali

Anche in questo caso si dispone di alcune rilevazioni sperimentali utili per effettuare un confronto del risultato CFD. La griglia utilizzata per simulare questo motore è riportata in figura 5.11, anche in questo caso *spray-oriented* e rappresentante solo 1/8 del volume interno al motore.

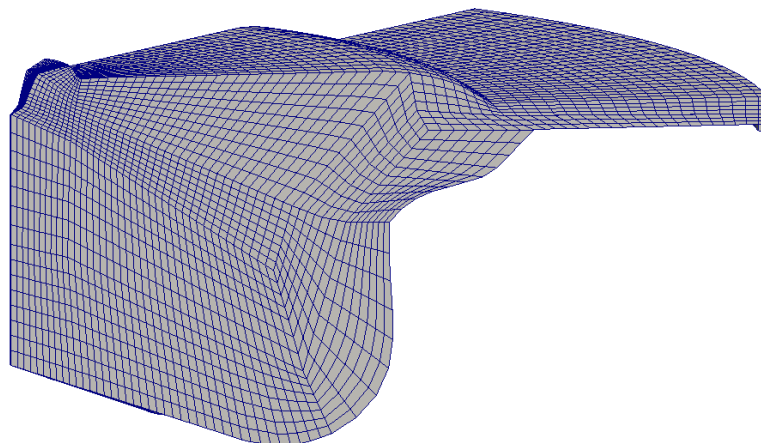


Figura 5.11: Griglia utilizzata per simulare il motore F1A

La strategia di iniezione seguita durante gli esperimenti consiste in una singola iniezione di gasolio, con SOI a -31.8 CAD e durata dell'iniezione pari a circa 17 gradi di manovella. La condizione operativa studiata sperimentalmente è la seguente:

- IVC = -140 CAD, EVO= 116 CAD
- $n = 3000$  [rpm]
- BMEP = 7.36[bar]
- $p_{IVC} = 1.97$  [bar]
- $T_{IVC} = 384$  [K]
- EGR  $\simeq 52$  %
- $\lambda = 1.225$

Si può notare come le condizioni di pressione e temperatura all'IVC siano simili a quelle del motore F1C precedentemente descritto. La condizione operativa del motore F1A è caratterizzata da un valore valore di  $\lambda$  inferiore, ma da un valore di ricircolo dei gas combusti (interno ed esterno) molto elevato. Questo comporta un elevato grado di diluizione della carica, ottenuto però limitando la quantità di aria introdotta e quindi la frazione massica di ossigeno. Ci si aspetta come conseguenza una produzione di ossidi di azoto veramente limitata.

L'utilizzo del modello termo-dinamico per la validazione delle condizioni iniziali è stato più problematico in questo caso. Non si è riusciti tramite questo strumento a replicare correttamente le condizioni operative ottenute sperimentalmente. Nello specifico, variando i parametri su cui di solito si agisce ( $p_{IVC}$  e  $T_{IVC}$ ), non si è riusciti ad ottenere il corretto profilo di pressione mantenendo allo stesso tempo il valore di massa intrappolata, ed il valore di  $\lambda$  globale, ottenuti sperimentalmente. Questo grado di incertezza creato dal disaccordo del modello utilizzato nei confronti dei dati sperimentali, ha condizionato le fasi iniziali del lavoro, facendo sì che si dovesse fare qualche prova in più per definire univocamente le condizioni iniziali. La via seguita è stata quella di mantenere lo stesso valore di  $\lambda$  indicato dalle prove sperimentali, parametro di grande influenza sulla cinetica chimica. Con questo obiettivo si è cercato poi un buon compromesso, che riuscisse ad ottenere valori di pressione e di massa intrappolata sufficientemente simili a quelli sperimentali. Il risultato finale è accettabile, tuttavia è possibile notare qualche lieve differenza fra il risultato CFD e lo sperimentale. Le condizioni ottenute dal modello termo-dinamico, utilizzate per inizializzare la simulazione, sono le seguenti:

- $p_{IVC}^{F1A} = 2.02$  [bar]

- $T_{IVC}^{F1AC} = 400$  [K]
- $Y_{O_2}^{F1A} = 0.1329$ ,  $Y_{CO_2}^{F1A} = 0.0836$ ,  $Y_{H_2O}^{F1A} = 0.0371$ ,  $Y_{N_2}^{F1A} = 0.7463$

Queste condizioni sono state utilizzate per inizializzare la cartella IVC ed avviare la simulazione di compressione, condotta da -140 CAD a -35 CAD, punto finale scelto per comodità considerato che il SOI è a -31.8 CAD.

### 5.2.2 Caratteristiche

Il motore PCCI che si descrive in questa sezione, adotta qualcuno di quegli accorgimenti di cui si è parlato nel paragrafo 2.2. Innanzitutto, guardando in figura 5.11, si può notare come la parete laterale della tazza del pistone sia praticamente verticale, accorgimento adottato per ridurre le emissioni combinate di inquinanti. Il motore F1C visto nel paragrafo precedente presentava invece una parete laterale della tazza molto inclinata.

Un'ulteriore differenza fra il motore F1A ed il motore F1C è la profondità della tazza. Per il motore F1A la tazza è più profonda, di conseguenza il volume della camera di combustione è più grande. Questo si traduce in una minore differenza di volume fra quando il motore si trova al BDC e quando si trova al TDC, che tradotto significa minor rapporto di compressione, condizione richiesta dai motori PCCI per limitare le temperature massime e quindi la produzione di ossidi di azoto. Secondariamente si può aggiungere che questa conformazione può lasciare al flusso di combustibile più spazio per distribuirsi, prima di essere deviato e portato a richiudersi su se stesso. Così facendo si garantisce una migliore miscelazione. Si noti in figura 5.12 l'evoluzione dello spray di combustibile e della distribuzione di Z, in quattro istanti diversi successivi al SOI ed antecedenti al SOC, ottenuti visualizzando i risultati della simulazione in forma grafica, con il software *ParaView*. Nella prima diapositiva in alto a sinistra viene mostrata la condizione del dominio CFD all'istante -30, nel quale il combustibile iniettato ad alta pressione percorre il volume della camera di combustione ad alta velocità, formando lo spray di goccioline rappresentato dalla nuvola di punti neri. Nella diapositiva successiva, in alto a destra, si può apprezzare il momento nel quale si verifica il fenomeno dell'*impingement*. Si vede infatti che le particelle di liquido, rappresentate dai punti neri, impattano contro la parete del pistone. Il valore di Z che assumono le celle a ridosso di tale zona è solitamente molto elevato. Si evidenzia che in questo motore, il punto di target assunto dallo spray coincide esattamente con il bordo superiore della tazza del pistone, strategia di cui si era già discussa nel capitolo dedicato alle caratteristiche dei motori PCCI. Analizzando la terza diapositiva in figura 5.12, in basso a sinistra, si può apprezzare il beneficio ottenibile adottando questa strategia. È molto probabile, nei motori PCCI, che si verifichi *impingement* sulle pareti del dominio, tant'è che non si cerca di evitarlo ma si vuole sfruttare

la velocità dello spray di combustibile per far impattare il combustibile sul bordo della tazza del pistone, che funge da setto divisore, creando due flussi separati che percorrono la camera di combustione in direzioni opposte, uno verso il fondo della tazza ed uno verso la zona di squish. L'ultima diapositiva in basso a destra raffigura infine la distribuzione di Z sul finire dell'evento di iniezione, evidenziando come le zone più ricche siano a ridosso della parete del pistone.

In figura 5.13 si può notare come il campo di moto venga modificato dall'evento di iniezione. Il vettore velocità, in due istanti diversi (-25 CAD e -14 CAD), viene rappresentato graficamente attraverso delle frecce che indicano localmente la direzione del flusso e l'intensità, al fine di far notare un fenomeno indotto dal trascinarsi operato dallo spray sulla massa di gas contenuta nella camera di combustione. Nella prima diapositiva a sinistra è raffigurato il campo di moto all'istante -25 CAD, pochi gradi di manovella dopo il SOI. In questo istante il campo di moto interno non ha ancora risentito particolarmente dell'influenza dello spray, ed è rimasto in buona parte invariato, soprattutto nel fondo della tazza. Si può notare che una certa massa di gas viene coinvolta dagli effetti di trascinarsi dello spray, in queste zone i vettori velocità non sono allineati a quelli delle zone imperturbate del dominio. A distanza di una decina di gradi di manovella, condizione rappresentata nella diapositiva di sinistra, la situazione è diversa. Si può notare come in tre diverse zone del dominio si siano formate alcune zone vorticosi. Lo spray, insistendo per diverso tempo sul bordo della tazza del pistone, crea due flussi contrapposti che percorrono la camera di combustione incontrando successivamente altri ostacoli e ripiegandosi su se stessi. Questo è quello che succede nella parte fonda della tazza e nella zona compresa fra lo spray e la zona di squish. In quest'ultima è proprio l'effetto combinato di spray e squish ad innestare un moto vorticoso molto intenso. Infine, un terzo vortice si instaura nella zona vicina all'ugello dell'iniettore, come effetto della direzione assunta dal gas che si allontana dalle altre due zone vorticosi. Questi effetti del campo di moto sono voluti e ricercati, al fine di ottenere un miscelamento intenso della carica e quindi un alto grado di premiscelamento al momento di inizio della combustione.

### 5.2.3 Discussione dei risultati

Come meccanismo di reazione per la simulazione con solutore CCM, si è utilizzato uno schema che utilizza 110 specie e 1331 reazioni chimiche. Si confrontano ora i risultati ottenuti risolvendo la chimica dettagliata con i risultati dati dal solutore CTC. In figura 5.14 si può trovare il confronto dei profili di pressione dei due solutori con quello sperimentale. Le piccole discrepanze riscontrabili fra il valore di pressione delle simulazioni CFD rispetto a quello sperimentale, apprezzabili alla fine della fase di compressione e durante la fase di espansione, sono dovute al fatto che non si è riusciti a replicare in maniera accurata il profilo di pressione

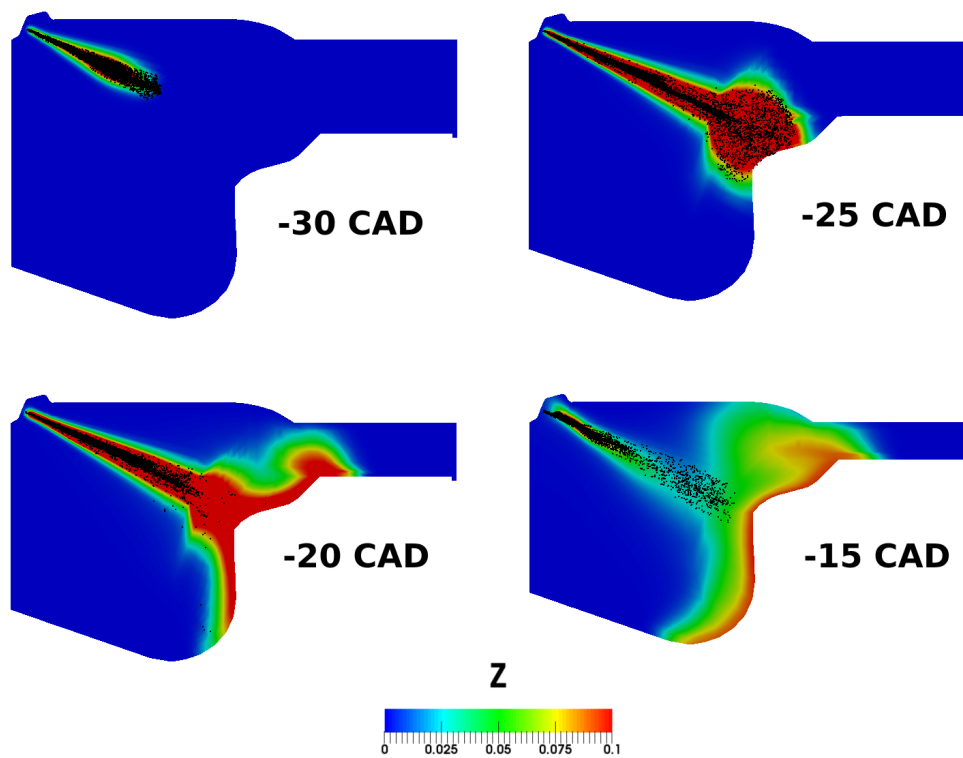


Figura 5.12: Spray e distribuzione di Z (F1A)

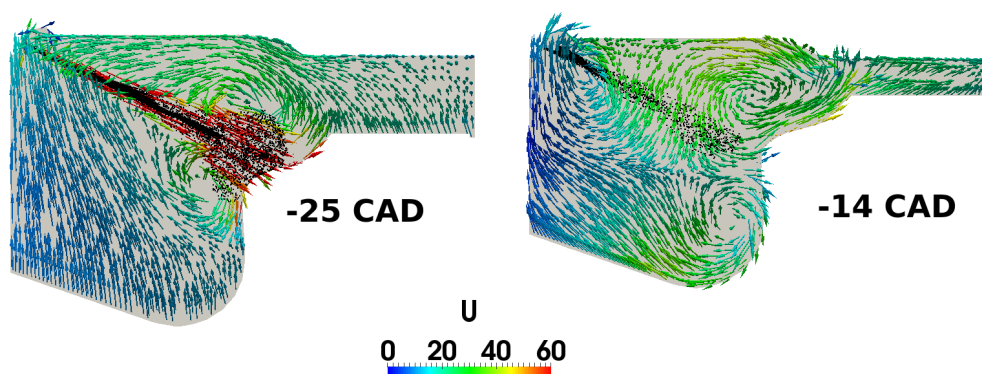


Figura 5.13: Campo di moto durante e dopo l'iniezione (F1A)

con l'utilizzo del modello termo-dinamico che stabilisce le condizioni iniziali. Le condizioni iniziali utilizzate hanno comunque restituito un risultato che è in buon accordo con quello sperimentale. Dalla figura 5.14 è inoltre evidente che il solutore CTC in condizioni PCCI non restituisce un risultato con un reale significato fisico.

Questo aspetto diventa ancora più manifesto se si confronta il tasso di rilascio del calore, in figura 5.15, che sottolinea la mancanza di consistenza del modello di combustione utilizzato dal CTC in condizioni PCCI. La previsione fatta non riesce a replicare il reale andamento del calore rilasciato, e mostra invece un comportamento non fisico, caratterizzato da un grande ritardo nell'accensione e da un salto a gradino, da zero a quasi  $1800 J/deg$  (non apprezzabile in figura), del rilascio di calore istantaneo. Successivamente a questo picco, il solutore CTC restituisce una curva dalla forma molto simile a quella che si ottiene nei normali motori Diesel, indice che il modello di combustione tende a "replicare" quel particolare comportamento anche in condizioni molto diverse. Si noti invece il solutore CCM restituisce una soluzione che replica molto bene la forma della curva sperimentale. La forma e l'intensità delle zone di picco dell'HRR sono molto simili, indice che l'utilizzo del meccanismo di reazione dettagliato ha portato a considerare una corretta evoluzione delle specie chimiche coinvolte nelle reazioni di ossidazione. Il confronto restituisce solo piccole differenze, nell'intensità e nella posizione dei picchi di HRR. Si sottolinea ancora una volta che il dato sperimentale AHRR, è ottenuto derivando il calore rilasciato in base alla pressione ed al volume del cilindro istante per istante, e può essere soggetto ad incertezza.

Si passa ora all'analisi dei risultati ottenuti riguardanti la produzione di inquinanti. In figura 5.17, 5.18 ed 5.19, si possono apprezzare le differenze nelle previsioni degli inquinanti. Il confronto fatto per il motore F1C, relativo quindi ad una condizione operativa in cui il solutore CTC risulta adeguato, mostrava un ottimo grado di accordo sul valore finale di emissioni di  $NO_x$  e  $CO$ . La condizione operativa relativa al motore F1A è molto diversa, soprattutto per quanto riguarda il valore di EGR e quindi la frazione massica di ossigeno presente nella carica. Questo motivo spiega la differente previsione nei valori finali degli inquinanti considerati. Diversamente da quello che ci si potrebbe aspettare, la previsione del valore finale della concentrazione di particolato è analoga a quella fatta dal solutore CCM. Il tasso di produzione e distruzione di questo inquinante durante il processo, non viene predetto in maniera corretta dal solutore CTC, dimostrando che il modello risulta essere inadeguato a tale scopo. Si conclude che l'accordo trovato sul valore finale di concentrazione di particolato, sia spiegabile con una pura coincidenza numerica e non da un'effettiva bontà della previsione effettuata dal solutore CTC.

Dopo aver dimostrato perché, per simulare la combustione in un motore PCCI, è necessario utilizzare un solutore che risolva la chimica dettagliata, si abbandona il confronto fra il solutore CTC ed il solutore CCM. Si cerca ora di studiare le ca-

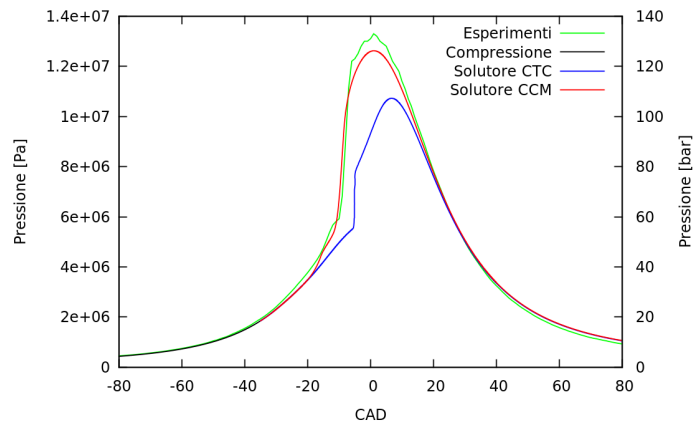


Figura 5.14: Confronto del profilo di pressione (F1A)

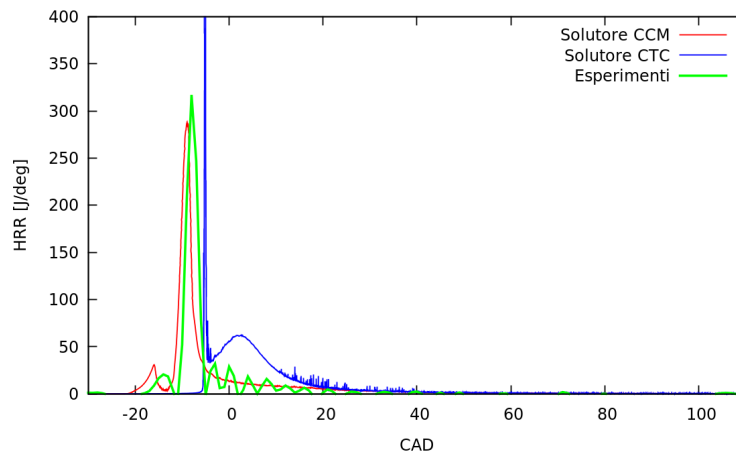


Figura 5.15: Confronto del rilascio del calore (F1A)

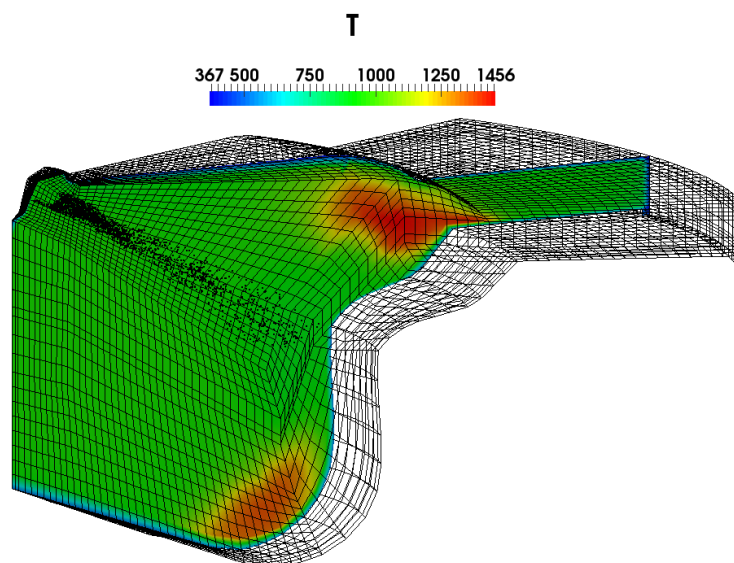


Figura 5.16: Zone in cui comincia la fase principale di rilascio del calore (F1A)



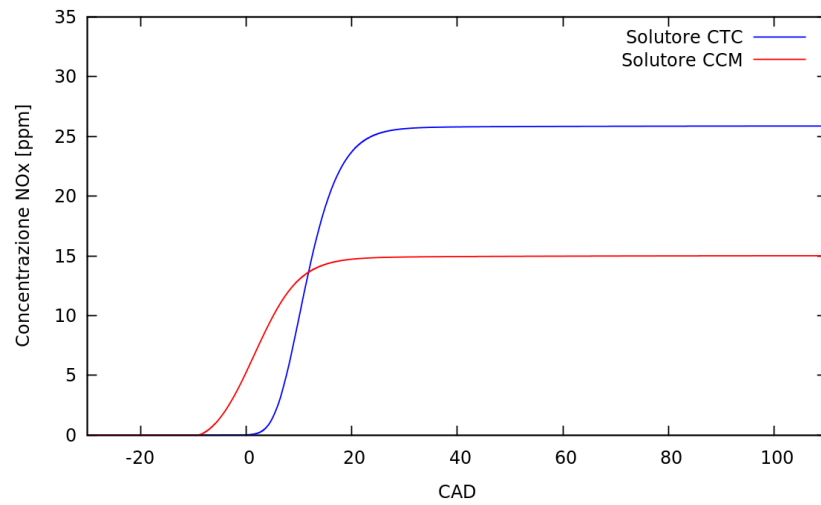


Figura 5.17: Concentrazione degli ossidi di azoto (F1A)

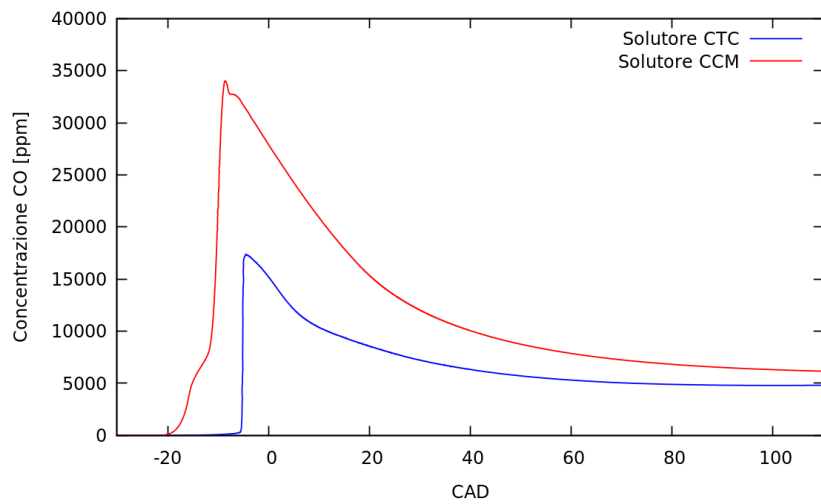


Figura 5.18: Concentrazione del monossido di carbonio (F1A)

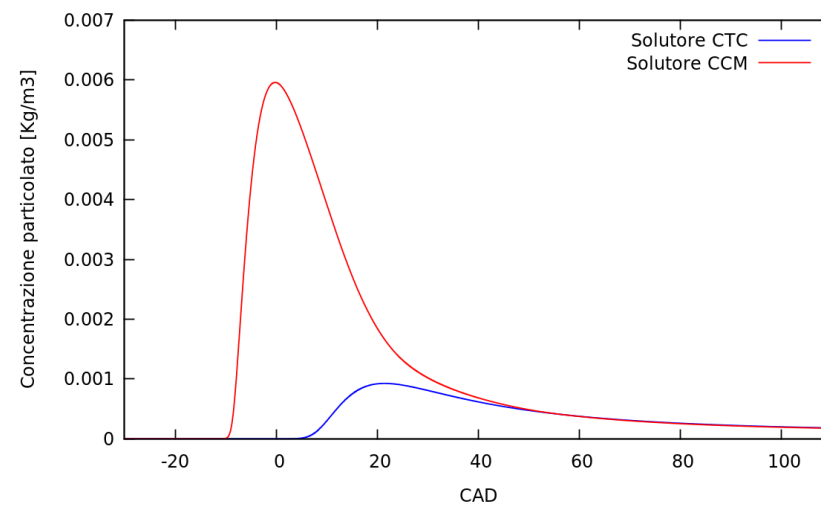


Figura 5.19: Concentrazione del particolato (F1A)

ratteristiche della combustione ottenuta nel motore F1A. Si porta all'attenzione la forma assunta dalla curva di rilascio del calore, che mette in evidenza ancora una volta il comportamento assunto dai combustibili paraffinici in combustioni LTC, descritto da due ignizioni successive divise dal regime NTC.

Lo stesso tipo di combustibile mostra un comportamento diverso in condizioni Diesel, in figura 5.3 relativa al motore F1C, si può notare che ad ogni evento di iniezione segue una fase crescente monotona della curva del rilascio, segno che la carica non viene mai a trovarsi nel regime NTC.

Il rilascio di calore principale è molto intenso se confrontato a quello del motore F1C, con un picco a circa  $300 J/deg$  contro circa  $120 J/deg$ , e di breve durata, circa 8 CAD (circa 0.45 millisecondi a 3000 rpm) contro circa 20 CAD (circa 1.7 millisecondi a 2000 rpm). Questo rende il motore PCCI analizzato molto rumoroso. Un rilascio di calore così intenso provoca un innalzamento repentino della pressione, tale da superare i limiti meccanici degli attuali motori. Si è calcolato un gradiente di pressione pari a  $86.4 [bar/ms]$  durante la prima ignizione, e addirittura pari a  $226.62 [bar/ms]$  durante la seconda ignizione. Un motore che funzioni con questo tipo di combustione deve essere progettato per resistere a sollecitazioni meccaniche maggiori.

In figura 5.20, come si era fatto per il motore F1C, si è riportato il grafico che confronta il liquido presente nel sistema ed il rilascio del calore. Il risultato ottenuto è molto diverso da quello ottenuto nella combustione Diesel tradizionale. In questo caso, la sovrapposizione della curva del liquido con la curva del rilascio del calore è minima. Il combustibile non ancora evaporato rappresenta una quantità molto piccola quando inizia il primo rilascio di calore (prima ignizione, attorno a -15 CAD), invece durante il rilascio di calore principale la quantità di liquido è praticamente nulla.

Si calcola ora il valore di  $Z_s$  relativo a queste condizioni operative. Utilizzando l'equazione 5.1, considerando che il combustibile utilizzato è lo stesso, l'unico parametro che varia fra il caso F1C ed il caso F1A è la frazione massica di ossigeno  $Y_{O_2}$ , che in questo caso è inferiore e vale 0.1329. Di conseguenza nel caso F1A, il valore di frazione di miscela stechiometrico vale:

$$Z_s^{F1A} \simeq 0.037$$

che rappresenta ancora l'ascissa del punto a massima temperatura, nel diagramma ZT di figura 5.22. Studiando le due fasi di ignizione, fig. 5.21 e 5.22, si può notare una differenza di comportamento fra la prima e la seconda fase di ignizione. È possibile notare che, in figura 5.21, la zona che denota un primo aumento delle temperature e quindi l'inizio delle reazioni di ossidazione, si trova nella parte del grafico caratterizzata da bassi valori di Z, non molto diversi dal valore stechiome-

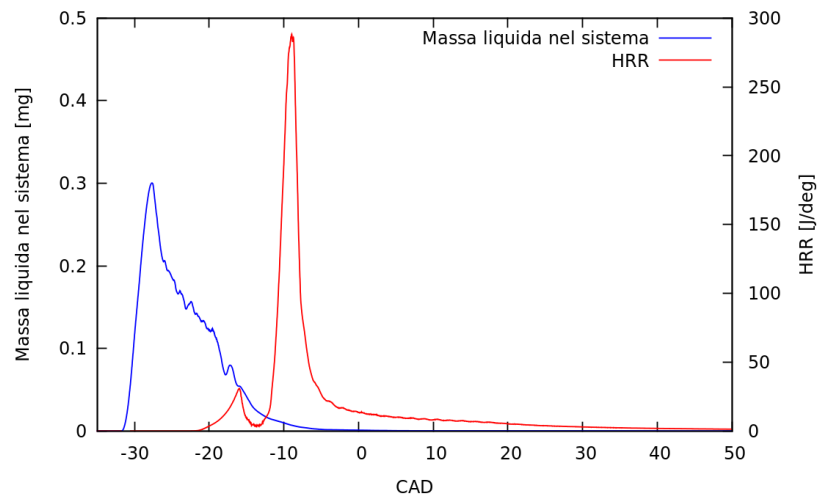


Figura 5.20: Presenza di liquido e HRR (F1A)

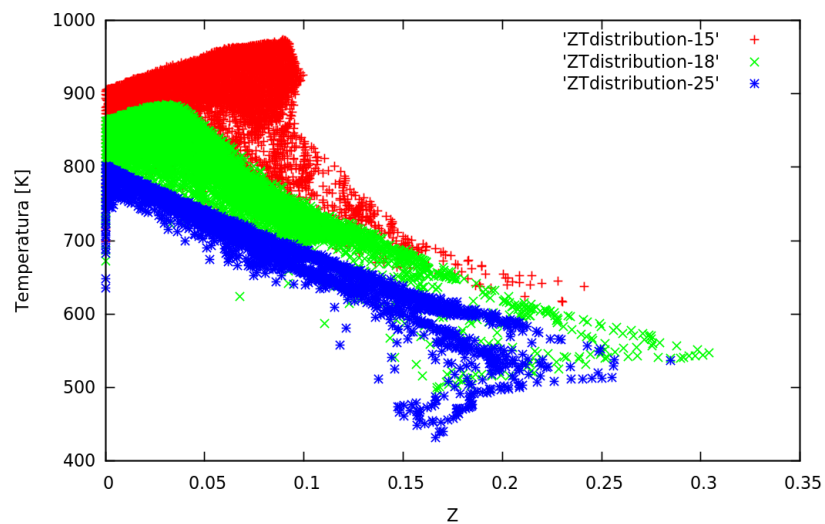


Figura 5.21: Distribuzione Z-T della prima ignizione (F1A)

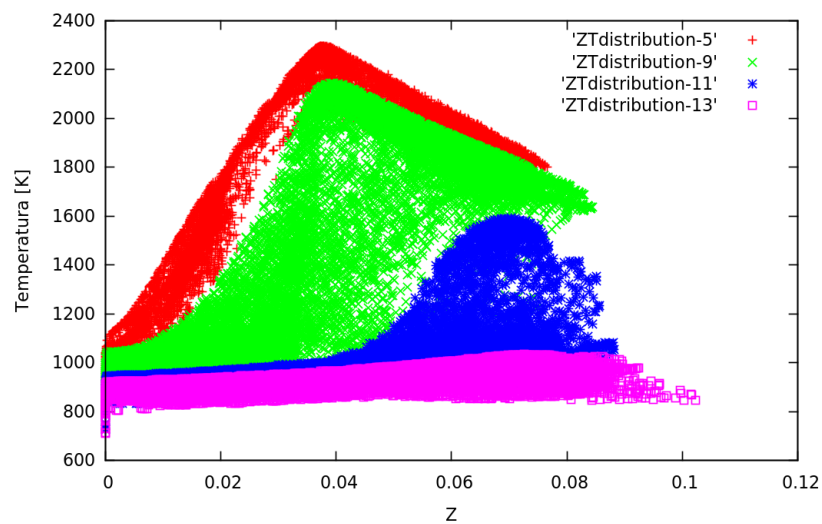


Figura 5.22: Distribuzione Z-T della seconda ignizione (F1A)

trico. La temperatura delle zone ricche di combustibile è infatti molto bassa ( $\leq 700$  K), in queste condizioni le reazioni di ossidazione sono considerevolmente inibite. Invece, per quanto riguarda l'ignizione principale, in figura 5.22 viene confermato quanto si era annunciato nei primi capitoli riguardo la dinamica del processo di accensione di una carica premiscelata, con la combustione che viene innescata dalle zone ricche di combustibile (le temperature iniziano ad alzarsi nella parte destra del grafico, dove  $Z$  vale all'incirca 0.07). Un'altra cosa che si può apprezzare guardando la figura 5.22, è la differenza della posizione della nuvola di punti fra gli istanti -13 CAD (prima dell'ignizione), -11 CAD (durante l'ignizione) e -9 CAD (nel pieno della combustione). In particolare la differenza fra la nuvola relativa all'istante -11 CAD e quella all'istante -9 CAD, permette di apprezzare la rapidità del fenomeno. Infatti a distanza di un tempo di circa 0.1 [ms] la fiamma, che a -11 CAD coinvolge solo la parte ricca di combustibile del dominio, si estende a tutto il resto del dominio alzando notevolmente le temperature. La nuvola di punto relativa all'istante -5 CAD, in rosso, rappresenta infine la distribuzione  $ZT$  a combustione quasi completata. Confrontando il diagramma  $ZT$  ottenuto per il motore F1A con quello ottenuto per il motore F1C si può verificare che si è riusciti ad ottenere una combustione caratterizzata da temperature massime inferiori (di circa  $300 \div 400$  K). L'effetto benefico della riduzione della temperatura di combustione è ben visibile nel grafico della produzione di ossidi di azoto (fig. 5.17), che indica una emissione finale dell'ordine di pochi ppm, con una riduzione di circa un fattore venti rispetto al caso F1C. L'effetto della diluizione della carica è visibile invece nel grafico riguardante la concentrazione di particolato (fig. 5.19), ridotta di circa un fattore dieci rispetto al caso F1C. In realtà non sarebbe corretto confrontare i valori di emissioni relativi a due condizioni di carico differenti, medio-alta per F1C e medio-bassa per F1A. Tuttavia, avendo notato una riduzione molto consistente del particolato prodotto (un ordine di grandezza), si può affermare con una certa sicurezza che l'adozione della strategia LTC ha portato gli effetti benefici sperati.

#### 5.2.4 Influenza del meccanismo di reazione

Come indicato precedentemente, per ottenere i risultati di combustione PCCI con il simulatore CCM, si è utilizzato un meccanismo di reazione moderatamente dettagliato, descritto da 110 specie e 1331 reazioni chimiche. Questo significa risolvere le equazioni del trasporto per 110 specie diverse, ad ogni istante computazionale, e calcolare la velocità di produzione di ognuna di queste specie, la quale viene valutata sommando gli effetti delle diverse reazioni che la coinvolgono. L'algoritmo di riduzione del meccanismo di reazione permette di disabilitare le specie inattive e le relative reazioni chimiche di cui fanno parte, permettendo un grande risparmio di tempo, soprattutto quando applicati a meccanismi di reazione molto dettagliati. Nonostante l'adozione di questa strategia, l'utilizzo di un meccanismo di reazione

descritto da un centinaio di specie implica un notevole aumento del tempo computazionale richiesto. Quando si conduce uno studio di ricerca, è importante disporre di strumenti che riescano a fornire dei risultati accurati in breve tempo.

In questo paragrafo si vuole analizzare l'effetto sui risultati dato dall'utilizzo di un meccanismo di reazione più leggero. Si è voluta quindi testare l'accuratezza di un meccanismo di reazione descritto da 54 specie e 278 reazioni. La simulazione di combustione nel motore F1A è stata ripetuta utilizzando questo meccanismo di reazione ridotto, per testarne il comportamento.

Il confronto dei profili di pressione è riportato in figura 5.23.

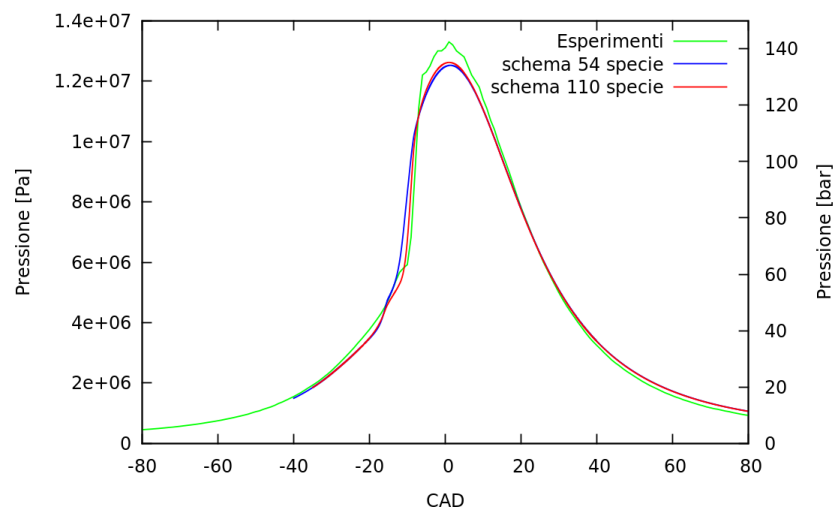


Figura 5.23: Influenza del meccanismo di reazione - Pressione (F1A)

Si può notare come anche il meccanismo di reazione ridotto sia in grado di prevedere il momento di autoaccensione della miscela, ottenendo una curva in accordo sia a quella sperimentale sia a quella ottenuta con il meccanismo dettagliato. In figura 5.24 si confronta invece la previsione sul tasso di rilascio del calore.

Nonostante il confronto dei profili di pressione non restituisse alcun problema evidente nell'utilizzo dello schema ridotto, facendo un confronto sul rilascio di calore si può apprezzare una certa differenza. È possibile notare che le fasi di rilascio del calore (prima e seconda ignizione), vengano anticipate con l'utilizzo del meccanismo ridotto, e che il ritardo che intercorre fra queste due sia inferiore rispetto a quello ottenuto con lo schema dettagliato. Si aggiunge una sovrastima del picco di rilascio del calore durante la prima ignizione, una sottostima di questa stessa grandezza durante la seconda ignizione, ed il rilascio di calore principale leggermente più duraturo (conseguenza dell'ottenimento di un picco più basso).

Nonostante le differenze siano evidenti, si può comunque ritenere che il risultato ottenuto con lo schema ridotto sia di buona qualità, in quanto si dimostra

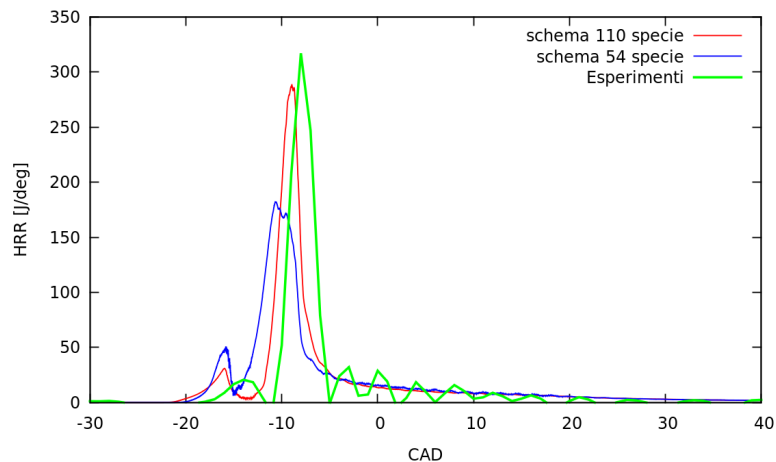


Figura 5.24: Influenza del meccanismo di reazione - Rilascio del calore (F1A)

capace di riprodurre il comportamento della *Two Stage Ignition* e di prevedere con sufficiente accuratezza il ritardo d'accensione.

Il risultato ottenuto si può considerare prezioso. Data la complessità del fenomeno simulato, avere la possibilità di utilizzare un meccanismo ridotto, per la previsione del momento di accensione di una combustione PCCI, è considerato un buon traguardo.

Si è voluta testare anche la capacità di previsione della produzione di inquinanti, utilizzando ancora i risultati ottenuti dallo schema dettagliato per il confronto.

La previsione risulta essere simile solo per il monossido di carbonio. Il valore finale degli ossidi di azoto, stimato con lo schema ridotto, viene sovrastimato al triplo del valore ottenuto con quello dettagliato. Il divario fra i risultati è ancora più grande se si prende in considerazione la produzione del particolato, che fra i tre inquinanti confrontati è quello più influenzato dall'evoluzione delle specie chimiche durante la combustione. Anche in questo caso la previsione del meccanismo ridotto sovrastima la produzione di tale inquinante, sia nel valore di picco che nel valore finale.

Il confronto effettuato permette di apprezzare la perdita di accuratezza conseguente dall'adozione di un meccanismo di reazione ridotto.

Come precisato precedentemente però, si può già considerare un buon risultato quello di poter utilizzare lo schema a 54 reazioni per la previsione del momento di auto-accensione. Nel capitolo successivo, si introdurrà un nuovo motore. Per le simulazioni che lo riguardano si è utilizzato questo schema ridotto, permettendo di ridurre notevolmente il tempo di calcolo e di concentrare il lavoro sullo studio del fenomeno dell'auto-accensione. Le previsioni degli inquinanti ottenute in queste simulazioni non verranno valutate nel loro valore assoluto, essendo stata dimostrata l'inaccuratezza della previsione fornita dallo schema; si potrà comunque utilizzarle

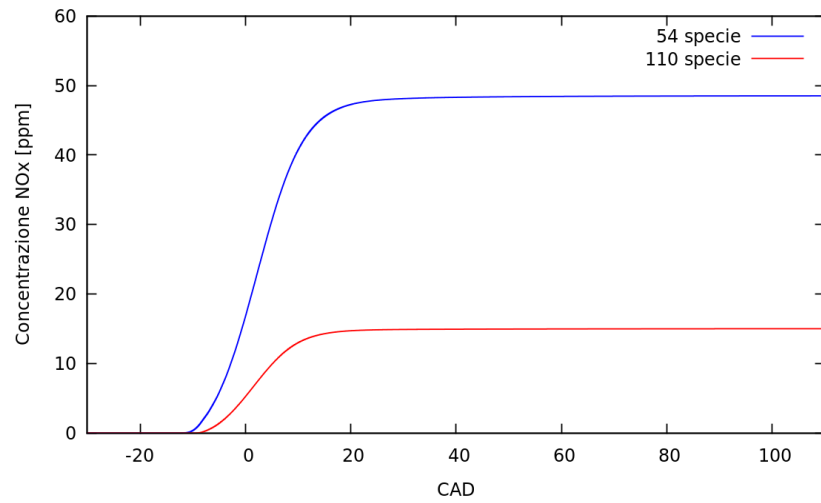
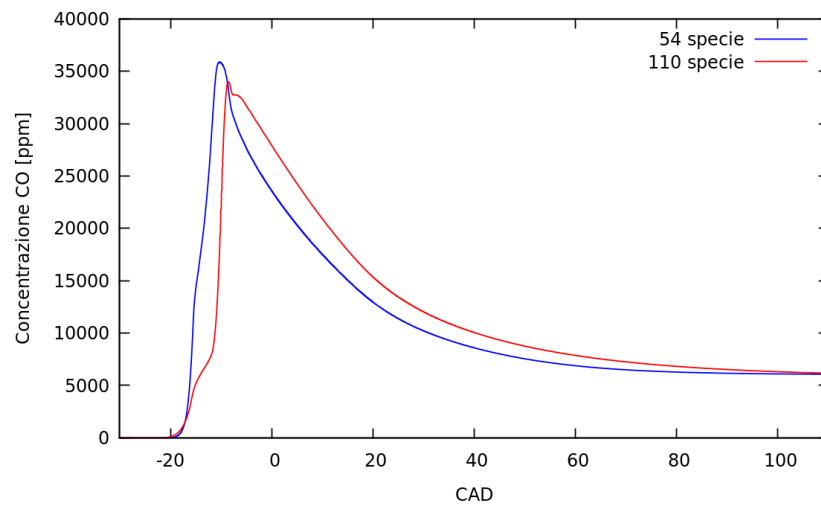
Figura 5.25: Schema dettagliato e ridotto: confronto  $NO_x$ 

Figura 5.26: Schema dettagliato e ridotto: confronto CO

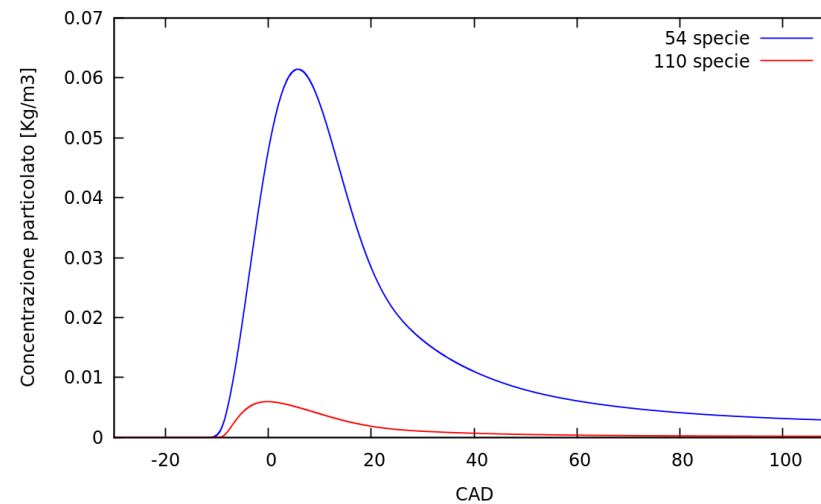


Figura 5.27: Schema dettagliato e ridotto: confronto particolato

in maniera comparativa, per confrontare due condizioni operative diverse e valutare l'effetto causato dalla variazione di un parametro.

### 5.3 Analisi di funzionamento del CCM in condizioni LTC

Le reazioni di ossidazione a bassa temperatura hanno un ruolo molto importante nelle combustioni LTC, infatti le specie chimiche che si vengono a formare durante la prima ignizione stabiliscono l'entità del ritardo d'accensione. È pertanto necessario che il solutore CCM riproduca correttamente il comportamento della chimica delle basse temperature per fare una previsione affidabile.

Si è voluta condurre un'analisi di sensitività dei risultati nei confronti del parametro `Z1zone.Span`, che in accordo alle impostazioni da noi utilizzate è il rapporto di equivalenza progressivo  $\varphi$ , al fine di comprendere l'effetto creato da una divisione in zone più e meno fine. Nelle simulazioni PCCI, per via dell'elevato gradiente del rapporto di equivalenza durante il processo, il numero di zone create è dovuto in gran parte al parametro  $\varphi$ ; la temperatura gioca soltanto un ruolo marginale, non viene pertanto effettuata una analisi di sensitività di questa grandezza. È stato simulato il funzionamento del motore F1A, fra gli istanti -35 CAD e +20 CAD, utilizzando tre diversi valori di questo parametro (*span*): 0.01, 0.02 e 0.05.

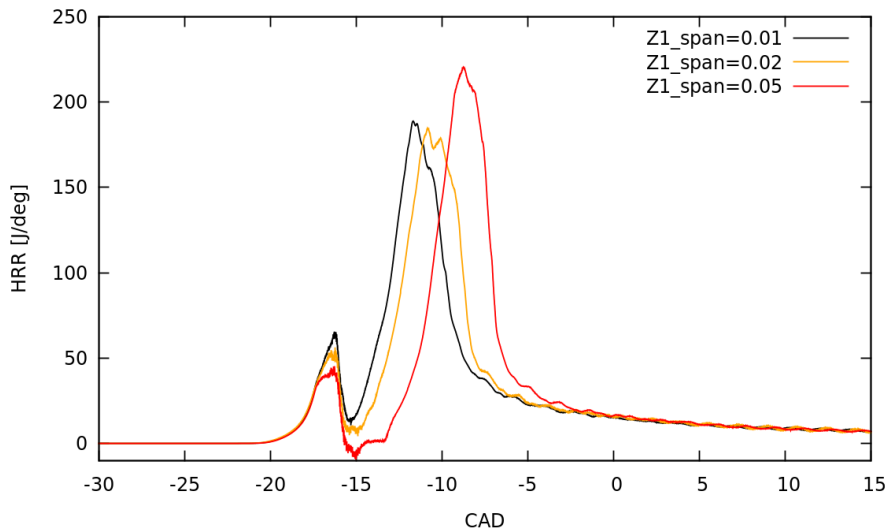


Figura 5.28: Influenza del parametro `Z1zone.Span` sulla forma della curva HRR

Come è possibile notare in figura 5.28, in cui è riportato il tasso di rilascio del calore, il comportamento mostrato dalle tre simulazioni è significativamente diverso. La simulazione con *span* di `Z1` più lasco (0.05, in rosso), mostra un picco più contenuto di rilascio del calore durante la prima ignizione, conseguentemente la



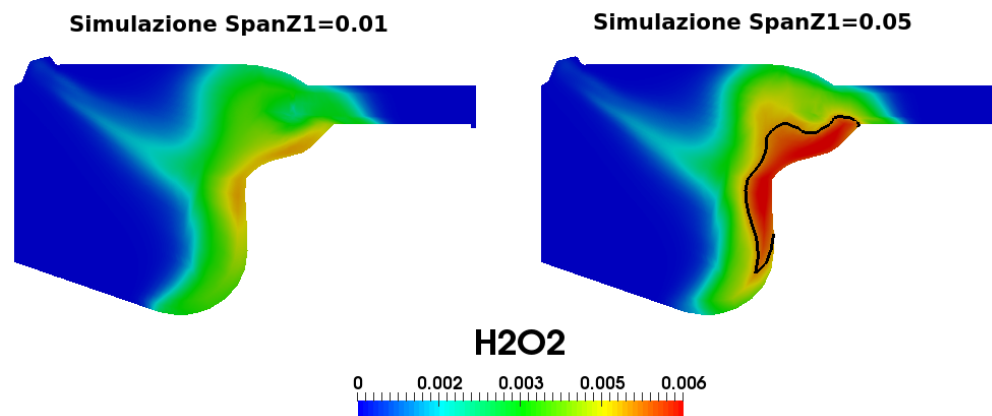


Figura 5.29: Variazione nella distribuzione del perossido di idrogeno al variare del valore di *span* di Z1, durante il regime NTC.

curva scende fino ad oltrepassare la linea di zero ed assumere quindi valori negativi (calore assorbito). Questo condiziona la previsione del momento di accensione, che viene ritardato, e del picco di tasso di rilascio del calore della seconda ignizione, che viene sovrastimato. Questo comportamento è difficilmente giustificabile, si suppone infatti che la curva corretta di rilascio del calore sia quella mostrata dalla simulazione con *span* di Z1 pari a 0.01, frutto di una divisione in zone più accurata.

La curva relativa alla simulazione con *span* più lasco assume valori negativi nell'intervallo (-15.5;-14.5), comportamento che non viene messo in mostra nelle altre due simulazioni con *span* più fine. Il processo di combustione, in questa fase, sta sperimentando il regime NTC e quindi un rallentamento delle reazioni di ossidazione. Si è condotta un'indagine con lo scopo di capire cosa comportasse questa differenza nei risultati.

Si è studiata quindi la prima fase di ignizione, per capire se fossero presenti eventuali differenze nel modo in cui è stata risolta la chimica. Come primo passo si è voluto analizzare visivamente il dominio CFD, con l'uso del software *Paraview*. Nel paragrafo 1.4.1 si è introdotto il concetto della *Two Stage Ignition*, e si è discusso della dinamica della prima e della seconda fase di ignizione, e delle specie che caratterizzano il regime NTC. Il ritardo fra la prima e la seconda ignizione è caratterizzato dalle specie chimiche che compaiono durante il regime NTC, che sono in particolare la formaldeide ( $H_2CO$ ) ed il perossido di idrogeno ( $H_2O_2$ ). Facendo un confronto diretto della frazione massica locale di quest'ultima specie, è possibile notare una differenza sostanziale fra la simulazione con *span* Z1=0.01 e quella con *span* Z1=0.05 (si veda in figura 5.29).

È possibile notare come la previsione fatta dalla simulazione con *span* di Z1=0.05 sovrastimi la quantità di perossido di idrogeno prodotta durante il regime NTC, rispetto alla previsione fatta dalla simulazione con *span* di Z1=0.01, più accura-

ta. Come spiegato nel paragrafo 1.4.1, la reazione di produzione del perossido di idrogeno può avvenire ad una temperatura inferiore ai 1000 K, valore oltre il quale viene invece favorita quella di decomposizione. Si è ipotizzato che una maggior produzione di questa specie potesse derivare da una distribuzione di temperatura differente nella simulazione a span lasco, caratterizzata da alcune zone a temperatura inferiore ai 1000 K, non presenti in quella a span fine.

La zona dove viene prodotta la maggior quantità di perossido di idrogeno è messa in evidenza tramite una linea nera, in figura 5.29. Sempre in *Paraview*, si è visualizzato il valore di temperatura di queste zona durante lo stesso istante di tempo, ottenendo una conferma dell'ipotesi fatta. La zona dove la produzione è alta è caratterizzata da temperature poco superiori ai 900 K e da valori di Z attorno a 0.08. Per apprezzare la differenza della previsione effettuata dalle due simulazioni, in figura 5.30 si riporta il grafico della distribuzione Z-T relativo all'istante -15 CAD.

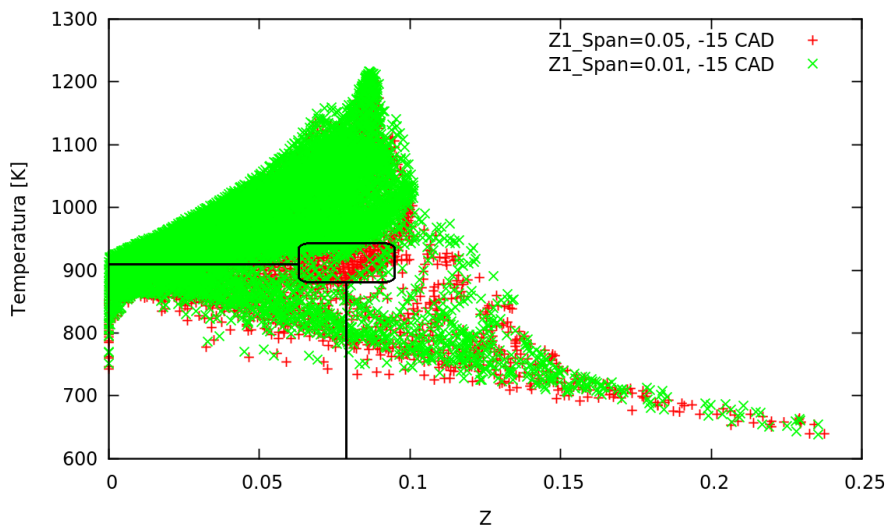


Figura 5.30: Distribuzione ZT all'istante -15 CAD

In tale grafico è messa in evidenza che la nuvola di punti creata dalle due simulazioni presenta una differente densità proprio nell'intorno dei valori di Z e T dove la quantità di  $H_2O_2$  è elevata. La differente densità di punti in questa in questa regione del diagramma Z-T indica che il solutore CCM ha generato una diversa divisione in zone per le due simulazioni, indicando che molti punti della simulazione con *span* di  $Z1=0.05$  ricadono nel regime NTC. La causa della maggior produzione di perossido di idrogeno nella simulazione a *span* lasco è quindi attribuibile agli inferiori valori di temperatura calcolati, conseguenza di un minore rilascio di calore durante la prima ignizione (si veda figura 5.28). Questo effetto si può spiegare studiando la divisione in zone effettuata dal CCM all'inizio delle

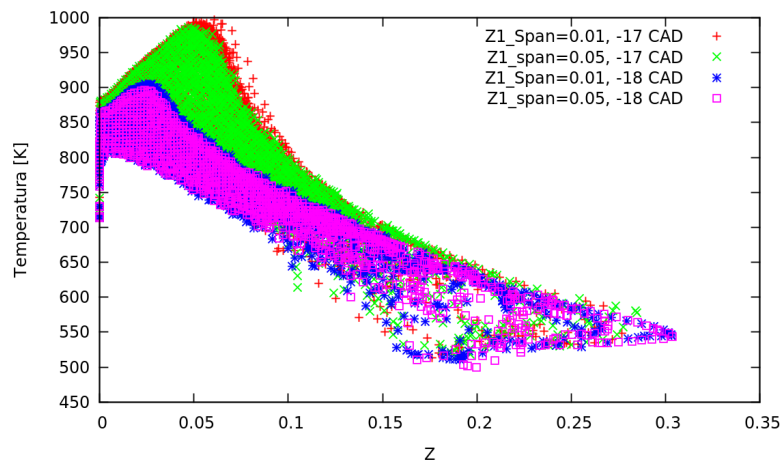


Figura 5.31: Distribuzione ZT negli istanti -18 e -17 CAD

reazioni di ossidazione relative alla prima ignizione. Si analizza quindi la distribuzione Z-T calcolata dai due solutori negli istanti -18 e -17 CAD per apprezzare le differenze create nella nuvola di punti Z-T utilizzando una divisione lasca ed una fine.

Il confronto effettuato in figura 5.31 mette in evidenza che la divisione in zone del dominio fisico, identifica punti a temperatura leggermente inferiore nella simulazione a *span* lasco. La generazione di zone a temperatura più alta, nel caso della simulazione a *span* più fine, porta ad intensificare leggermente il rilascio di calore, facendo sì che una regione più piccola del dominio ricada nel regime NTC.

Per dimostrare se la ricostruzione effettuata è corretta, si è effettuato un test per dividere i diversi effetti che possono concorrere alla spiegazione del problema.

Nello specifico, si voleva cercare di capire se fosse solo la quantità di calore rilasciata durante la prima ignizione a condizionare il comportamento nell'intervallo di tempo fra la prima e la seconda ignizione, oppure se ci potessero essere altri effetti, ad esempio il valore di *span* di Z1 utilizzato durante la fase NTC.

Si è quindi partiti dalla soluzione generata dalla soluzione con *span* di Z1=0.01 agli istanti -14 CAD e -16 CAD, per creare due nuovi casi da avviare con un valore di *span* di Z1=0.05 e studiarne il comportamento.

I risultati sono riportati in figura 5.32. Trascorrendo le discrepanze iniziali fra la curva relativa alla simulazione con *span* di Z1=0.01 e le curve dei casi che partono a -16 CAD e -14 CAD utilizzando *span* di Z1=0.05, create da effetti numerici, si può notare come il risultato ottenuto sia molto simile. Questo dimostra che il rilascio di calore durante la prima ignizione condiziona fortemente il resto del processo, e che il valore di *span* di Z1 utilizzato dopo tale fase ha un influenza minima o nulla. Si sottolinea però la necessità di adottare valori di *span* di Z1 sufficientemente piccoli per effettuare una buona previsione del calore rilasciato

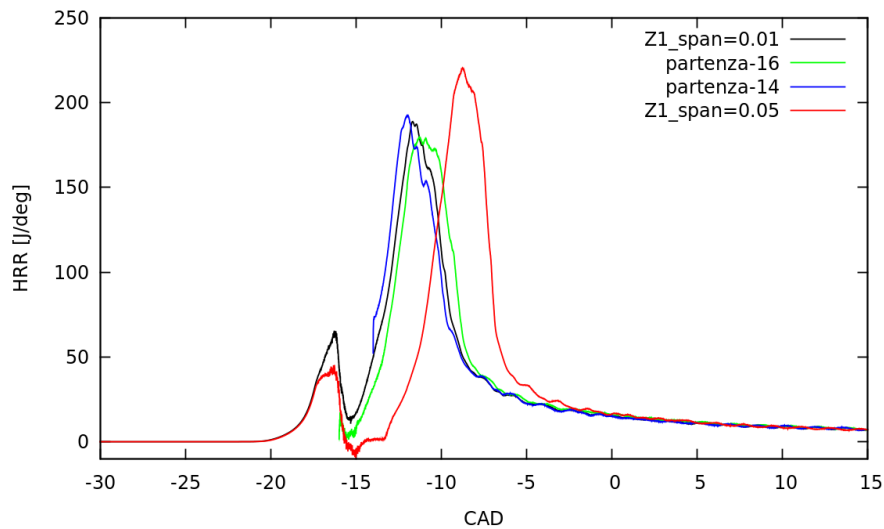


Figura 5.32: Influenza del parametro  $Z1_{zone\_Span}$  sul comportamento della simulazione dopo la prima fase di rilascio del calore

durante la prima ignizione. Per le simulazioni svolte durante questo lavoro di tesi ci si è sempre assicurati di utilizzare valori di *span* di  $Z1$  adeguati. In particolare, si è notato che adottare uno *span* di  $Z1$  pari a 0.02 costituisce un buon compromesso fra accuratezza dei risultati e velocità di calcolo. Questo valore è stato applicato a tutte le simulazioni effettuate.

Questa analisi fornisce un suggerimento su come poter eventualmente modificare e migliorare l'algoritmo CCM, in modo che adotti una strategia di divisione in zone dinamica, riducendo a dovere il valore di *span* di  $Z1$  durante la prima fase di rilascio del calore per poi ritornare ad un valore più alto, riducendo quindi il tempo computazionale richiesto senza ridurre sensibilmente l'accuratezza dei risultati.

## Capitolo 6

### Il motore F1C-PCCI

In questo capitolo si utilizza il solutore CCM per condurre diverse indagini sul comportamento della combustione in un motore PCCI. In seguito all'essersi accertati che lo strumento CFD restituisse dei risultati affidabili, tale strumento è stato utilizzato al fine di simulare il comportamento di un motore in via di progettazione. Tale motore è stato ideato da Fiat Powertrain Technologies, usando come base di partenza l'esperienza maturata con i motori F1A ed F1C. Non trattandosi di un motore realmente costruito, ma solo di un progetto, non si dispone di rilevazioni sperimentali.

L'obiettivo è quello di utilizzare la CFD in sostituzione alle prove sperimentali, almeno in qualcuna delle fasi evolutive di questo progetto. La potenzialità delle simulazioni CFD sta proprio nella possibilità di condurre diverse indagini, riguardanti il funzionamento di un'apparecchiatura, partendo solo dai dati necessari per descriverla numericamente. Quelle prove che nella realtà richiederebbero delle modifiche all'apparato o la predisposizione di strumenti aggiuntivi, possono essere effettuate senza dover sostenere nessun costo aggiuntivo e senza dover sottostare ai tempi di produzione del materiale necessario.

La CFD si presta in particolare a farsi carico di quelle fasi intermedie, durante lo sviluppo di un progetto, nelle quali si sperimentano nuove strade.

In questo capitolo si utilizza il solutore CCM per studiare la risposta del nuovo motore in fase progettuale alla variazione di parametri operativi quali SOI, inclinazione dello spray, grado di ricircolo dei gas combusti e temperatura del combustibile iniettato. Infine si sperimenta l'utilizzo di una differente legge di iniezione.

#### 6.1 Descrizione del progetto F1C-PCCI

Il progetto F1C-PCCI prevede lo sviluppo di un motore che abbia un funzionamento duale, cioè che generi la combustione PCCI ove questa sia sostenibile e quella Diesel tradizionale nei restanti punti operativi. L'obiettivo finale è quello di ottenere un motore che riesca a funzionare efficientemente in entrambe le modalità.

Questo progetto ambizioso richiederà una lunga fase di studio e sperimentazione prima di arrivare alla fase evolutiva finale. In questo lavoro di tesi si sono buttate le basi per lo studio del fenomeno, grazie alla validazione del solutore CCM, che si è dimostrato sufficientemente accurato nel prevedere la combustione che si genera nei motori PCCI. In questa fase conclusiva del lavoro, si analizza l'influenza delle principali strategie di controllo applicabili, cercando di ottenere ad ogni condizione un risultato efficiente. Nel resto di questo capitolo, per comodità, ci si riferirà a questo motore utilizzando la sigla FP.

### 6.1.1 Condizioni operative e geometria

La condizione operativa su cui si è testato il funzionamento del motore è molto simile a quella utilizzata per il motore F1A: il rapporto di compressione vale 14.1 e la BMEP di riferimento è di 7.5 bar (di nuovo relativa ad un carico medio-basso). È possibile visualizzare in figura 6.1 la griglia utilizzata per le simulazioni del motore FP. Anche in questo caso il settore che rappresenta il dominio computazionale è 1/8 del volume del motore. Si vuole far notare che la griglia utilizzata in questo caso non è *spray-oriented*, aspetto facilmente riconoscibile se si confronta la disposizione delle celle con quella della griglia utilizzata per il motore F1A, al capitolo precedente. Altro aspetto degno di nota è la ridotta altezza della zona di squish, sempre con rispetto alla griglia del motore F1A, caratteristica che lo rende più simile al motore F1C. Di conseguenza ci si aspetta una intensificazione dei moti vorticosi durante la combustione, provocata dalla maggior massa di gas che deve evacuare dalla zona di squish durante la fase finale della risalita del pistone. La geometria della tazza del pistone è invece molto simile a quella del motore F1A, fatto salvo per un maggior valore dell'alesaggio che la rende più larga.

Le condizioni operative forniteci per lo studio del motore FP sono:

- IVC= -145 CAD, EVO= 110 CAD
- $n = 3000$  [rpm]
- BMEP = 7.5 [bar]
- $p_{IVC} = 1.63$  [bar]
- $T_{IVC} = 359.5$  [K]
- EGR  $\simeq 49$  %
- $\lambda = 1.19$
- $Y_{O_2}^{FP} = 0.1374$ ,  $Y_{CO_2}^{FP} = 0.0783$ ,  $Y_{H_2O}^{FP} = 0.0402$ ,  $Y_{N_2}^{FP} = 0.7441$

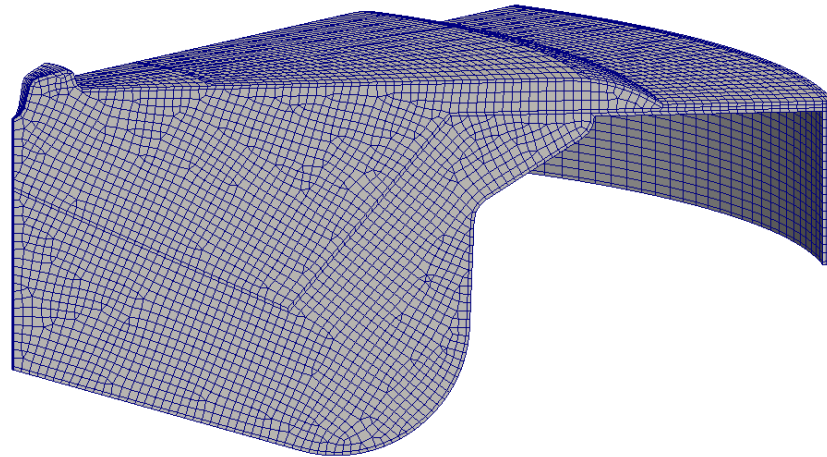


Figura 6.1: Griglia utilizzata per simulare il motore FP

Le condizioni di EGR,  $\lambda$  e frazioni massiche qui indicate sono relative alla condizione di funzionamento PCCI. Per la condizione di funzionamento Diesel si introdurranno più avanti le condizioni operative scelte. Il SOI indicato per questa condizione operativa è -35 CAD, con una durata dell'iniezione pari a circa 20 CAD. Non è stato necessario effettuare alcuna validazione delle condizioni iniziali in questo caso, in quanto non si doveva cercare di replicare alcuna curva di pressione sperimentale. Pertanto queste condizioni sono le stesse utilizzate per inizializzare il caso CFD.

### 6.1.2 Valutazione dei risultati ottenuti

In questo capitolo, come si vedrà più avanti, non si effettueranno le simulazioni solo per la modalità Diesel e per la modalità PCCI con le condizioni operative appena riportate. Si effettueranno delle indagini su altre condizioni di funzionamento, e per ognuna di esse sarà necessario valutare il risultato ottenuto. Per ognuna delle condizioni operative che si testeranno con l'uso solutore CCM, si valuteranno:

- $Q_{comb}$ : calore rilasciato dall'ossidazione del combustibile. Utilizzato per valutare il livello di completamento delle reazioni di ossidazione.
- $L_{gross}$ : lavoro lordo ottenuto durante la fase a valvole chiuse del ciclo di lavoro. Non tiene in considerazione il lavoro necessario all'introduzione ed estrazione del fluido di lavoro, le perdite per attrito ed il trascinamento degli ausiliari.
- $\left(\frac{dp}{dt}\right)_{MAX}$ : gradiente di pressione massimo riscontrato durante il processo di combustione, può dare una indicazione del livello di rumorosità del motore.

Il valore  $Q_{comb}$  per ogni condizione operativa studiata si otterrà dall'ultima riga scritte dal solutore nel file *cumRoHR.Cyl*, contenente il valore cumulato del calore rilasciato istante per istante. L'ultima riga, di conseguenza, contiene quindi il calore totale rilasciato dalle reazioni di ossidazione durante tutto il processo. Il valore  $L_{gross}$  invece viene calcolato utilizzando i file *p.Cyl* e *vol.Cyl* creati dal solutore, contenenti rispettivamente pressione media e volume del settore in ogni istante computazionale. È possibile calcolare  $L_{gross}$  secondo l'equazione 6.1:

$$L_{gross} = \int_{IVC}^{EVO} p dV \quad (6.1)$$

dove  $p$  è il valore della pressione nel cilindro ad ogni istante, e  $dV$  indica la variazione di volume. Disponendo di valori discreti per ognuna delle due grandezze, il calcolo è stato effettuato numericamente utilizzando il metodo dei trapezi. Utilizzando  $Q_{comb}$  ed  $L_{gross}$  si valuteranno altre grandezze utili, definite dallo stesso autore di questa tesi per comodità, necessarie a valutare l'efficienza della combustione ottenuta:  $\eta_{comb}$ ,  $\eta_{gross}$  e GMEP.

La prima delle tre è utile per apprezzare in maniera comoda ed intuitiva il grado di completamento delle reazioni di ossidazione, secondo la seguente equazione:

$$\xi_{comb} = \frac{Q_{comb}}{Q_{tot}} \quad (6.2)$$

$Q_{tot}$  è il calore rilasciato dalla completa ossidazione del combustibile, e si calcola in accordo alla 6.3:

$$Q_{tot} = m_{comb} * LHV_{C_{12}H_{26}} \quad (6.3)$$

dove  $m_{comb}$  è la massa di combustibile iniettata, ed  $LHV_{C_{12}H_{26}}$  è il potere calorifico inferiore del normal-dodecano, il combustibile utilizzato per simulare la combustione in questo motore. Per tutte le simulazioni descritte in questo capitolo si sono utilizzati i seguenti valori:

- $m_{comb} = 3.66e-5$  [kg]
- $LHV_{C_{12}H_{26}} = 44.467$  [MJ/kg]

Si calcola ora il calore di riferimento per questo motore, ottenibile in caso di completa ossidazione:

$$Q_{tot} = 1627.85[J]$$



La seconda delle grandezze che si valuterà, vuole invece dare un'idea dell'efficienza termo-dinamica della combustione generata:

$$\eta_{comb} = \frac{L_{gross}}{Q_{comb}} \quad (6.4)$$

Questo parametro serve ad apprezzare la differenza fra una combustione completa ed una efficiente. Come vedremo, le combustioni PCCI che generano un rilascio di calore molto intenso nelle prossimità del TDC, saranno caratterizzate da valori molto alti di  $\eta_{comb}$ .

Si definisce un ultimo indice di efficienza, che tiene in considerazione sia il livello di completezza dell'ossidazione, sia l'efficienza del processo di conversione dell'energia termica in lavoro meccanico, calcolato come segue:

$$\eta_{gross} = \xi_{comb} * \eta_{comb} = \frac{Q_{comb}}{Q_{tot}} * \frac{L_{gross}}{Q_{comb}} = \frac{L_{gross}}{Q_{tot}} \quad (6.5)$$

L'ultimo parametro di interesse che si vuole valutare è la GMEP, acronimo di *Gross Indicated Mean Effective Pressure*. È un parametro indicativo del lavoro prodotto durante la fase del ciclo di lavoro a valvole chiuse, ed è indipendente dalla grandezza del motore. La GMEP, così come la BMEP, è indicativa del carico richiesto al motore. Il calcolo è stato effettuato in accordo alla seguente equazione:

$$GMEP = \frac{L_{gross}}{V_{cil}} \quad (6.6)$$

dove  $V_{cil}$  rappresenta il volume del cilindro, che per il motore FP vale  $V_{cil} = 749.53$  [cm<sup>3</sup>]. Nel resto di questo paragrafo si descrivono le simulazioni svolte utilizzando il motore qui descritto. Per prima cosa si è testata la modalità di funzionamento PCCI, si è analizzato poi il risultato ottenuto e si è fatto un confronto con il precedente motore PCCI, ovvero l'F1A. Si effettuerà un confronto delle grandezze di efficienza introdotte, al fine di capire quale motore sia il più efficiente. In seguito si testerà anche la modalità Diesel del motore FP. Anche in questo caso si confronteranno i valori di efficienza e di produzione di inquinanti.

## 6.2 Simulazione di combustione nel motore F1C-PCCI

Come nel capitolo precedente, si è utilizzato il solutore CCM al fine di simulare la combustione nel motore descritto al paragrafo 6.1.1. Non si effettueranno più confronti dei risultati ottenuti con quelli forniti dal solutore CTC, avendo appurato che questi non è in grado di prevedere correttamente lo sviluppo della combustione in condizioni PCCI. La scelta del combustibile da usare per simulare il motore FP,

progettato per funzionare a gasolio, è ricaduta nuovamente sul normal-dodecano, per gli stessi motivi descritti al capitolo precedente. Essendo questa una fase di indagine, nella quale è necessario svolgere molte simulazioni al fine di acquisire una maggiore conoscenza del fenomeno, si è scelto come meccanismo di reazione quello ridotto, descritto da 54 specie e 278 reazioni, di cui si è parlato al paragrafo 5.2.4. L'utilizzo di questo meccanismo di reazione è fondamentale per ridurre il tempo di calcolo. Viste le discrepanze riscontrate fra il funzionamento dello schema ridotto e quello dettagliato, si utilizzeranno i risultati ottenuti in maniera puramente comparativa.

Al fine di poter confrontare il motore FP con i motori F1A ed F1C, sia in termini di prestazioni che di produzione di inquinanti, è necessario utilizzare nel confronto i dati ottenuti con l'uso dello stesso meccanismo di reazione. Così facendo ci si assicura che la chimica sia risolta in maniera coerente nelle diverse simulazioni, rendendo il confronto fra i risultati significativo.

Come giustificato nel paragrafo 5.3, si è adottato un valore di  $Z_{1zone\_Span}$  pari a 0.02, valore che si è confermato un buon compromesso fra accuratezza e rapidità di calcolo.

### 6.2.1 Funzionamento in modalità PCCI

Si è testata la condizione operativa descritta al 6.1.1. Come fatto per le precedenti simulazioni, si è prima simulata la fase di compressione, impostando nella cartella IVC i valori delle frazioni massiche relative ad un contenuto di gas di ricircolo pari circa al 49 %. Il risultato ottenuto è stato utilizzato per inizializzare il caso della combustione. Si riporteranno nel medesimo grafico il risultato relativo al motore FP e quello relativo al motore F1A. In figura 6.2 è possibile confrontare il profilo di pressione restituito dal solutore, per i due motori. La prima cosa che è possibile notare è il differente istante di accensione che caratterizza i due motori. Difatti, l'accensione nel motore F1A è molto anticipata rispetto a quella nel motore FP. A spiegazione di questo aspetto si riportano diverse motivazioni. La principale risiede nella condizione operativa più "estrema" testata sul motore FP, condizionata da temperature e pressioni all'IVC inferiori, che hanno l'effetto di inibire la cinetica delle reazioni chimiche. Un'ulteriore spiegazione dell'aumento del ritardo d'accensione nel motore FP può essere trovata nell'iniezione anticipata di combustibile. Infatti, iniettando il combustibile in anticipo nella camera di combustione, si può ottenere una miscela più omogenea. La mancanza di zone significativamente più ricche rispetto al resto della carica, rende il processo di auto-accensione meno favorito, pertanto questo avverrà in una fase più avanzata della compressione.

Un'accensione ritardata, come quella messa in mostra nel motore FP, ha un consistente effetto benefico sull'efficienza della combustione. Il rilascio principale

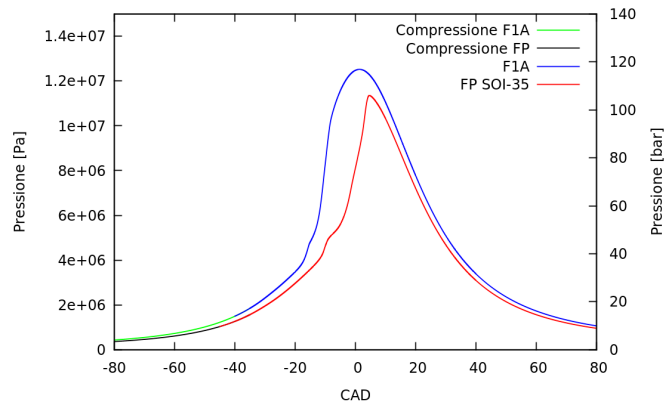


Figura 6.2: Confronto del profilo di pressione del motore F1A con quello del motore FP

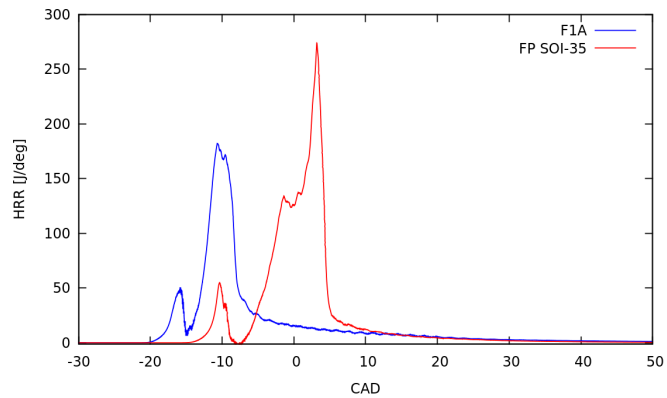


Figura 6.3: Confronto del tasso di rilascio di calore del motore F1A con quello del motore FP

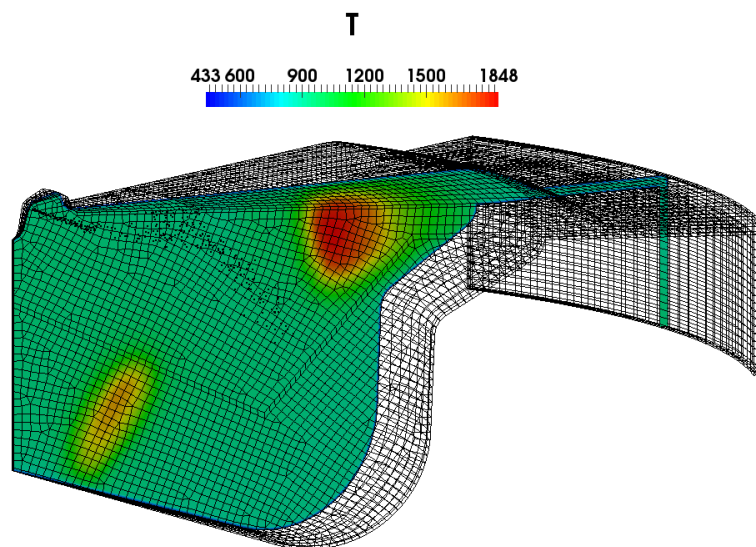


Figura 6.4: Zone in cui comincia la fase principale di rilascio del calore (FP)

di calore infatti viene sperimentato negli angoli di manovella in prossimità del TDC (6.3), provocando la crescita della pressione nel momento più opportuno. Se questo avvenisse in anticipo, si dovrebbe sostenere del lavoro di compressione aggiuntivo, il quale avrebbe un effetto penalizzante sul ciclo di lavoro. Si noti che il ritardo fra la prima e la seconda ignizione nel motore FP è maggiore rispetto a quello ottenuto nel motore F1A, questo è un'ulteriore conferma del rallentamento delle reazioni di ossidazione, le quali arrivano addirittura ad una battuta d'arresto (rilascio di calore nullo) in corrispondenza del regime NTC.

Si confrontano ora le emissioni di inquinanti relative ai due motori. In figura 6.5 si può notare che la produzione di ossidi di azoto è leggermente inferiore per il motore FP, dovuta principalmente al rilascio del calore ritardato e quindi ad una minor permanenza del sistema alle alte temperature. In ogni modo, la quantità assoluta prodotta nei due motori è talmente bassa da costituire una differenza significativa. Si viene ora al confronto del monossido di carbonio prodotto (fig. 6.6), che vede un valore finale di 6050 [ppm] per il motore F1A e 810 [ppm] per il motore FP. Questo confronto indica che la combustione è avvenuta in maniera molto più completa nel secondo motore. Anche sul fronte del particolato il motore FP si dimostra essere migliore, con un valore di 0.15 [ $g/m^3$ ] contro i 2.7 [ $g/m^3$ ] ottenuti nel motore F1A. La ridotta produzione di CO e di particolato riscontrata nel nuovo motore sono sintomo di un processo di miscelamento che avviene in maniera molto efficiente, sia durante la fase di preparazione della carica sia durante quella della combustione.

In figura 6.8 si vede che il rilascio di calore principale avviene in un momento in cui la massa di liquido nel sistema è praticamente nulla. Di conseguenza le reazioni di ossidazione avvengono quasi totalmente in fase premiscelata, spiegando ulteriormente l'effetto benefico riscontrato sulla produzione di inquinanti. Si analizza ora la modalità dell'accensione della carica nel motore FP. Facendo ancora riferimento all'equazione 5.1, utilizzando la frazione massica di ossigeno espressa al paragrafo 6.1.1, si è eseguito il calcolo della Z stechiometrica, ottenendo per questo caso il seguente valore:

$$Z_s^{FP} \simeq 0.038$$

simile a quello che si era ottenuto nel motore F1A. In figura 6.9 e 6.10 si riportano le distribuzioni ZT degli istanti di principale interesse, mettendo in mostra la modalità di accensione durante la prima e la seconda fase di rilascio del calore. Come per il motore F1A, la prima ignizione avviene in zone magre e successivamente le reazioni di ossidazione arrivano a coinvolgere anche le zone più ricche. Per la seconda ignizione succede al contrario, le reazioni di ossidazione partono dalle zone ricche e si spostano progressivamente verso quelle magre.

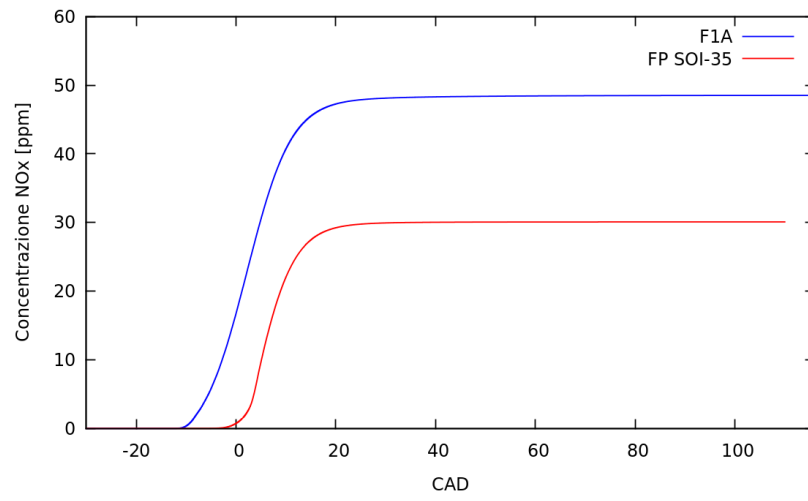


Figura 6.5: Concentrazione degli ossidi di azoto (FP)

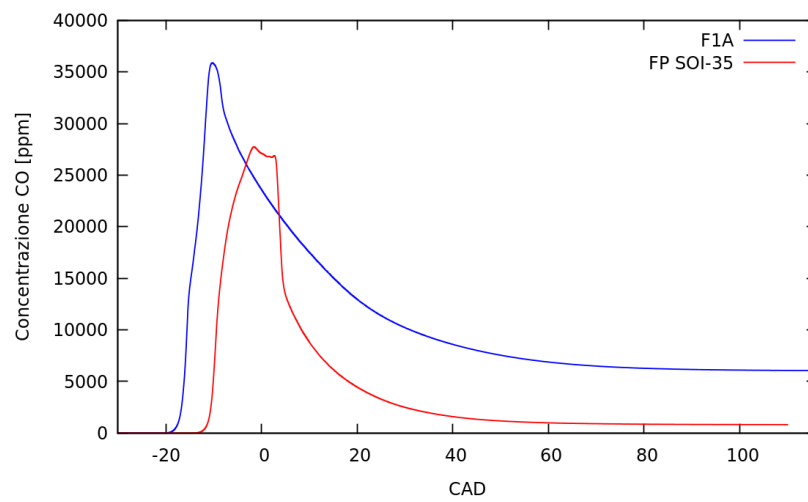


Figura 6.6: Concentrazione del monossido di carbonio (FP)

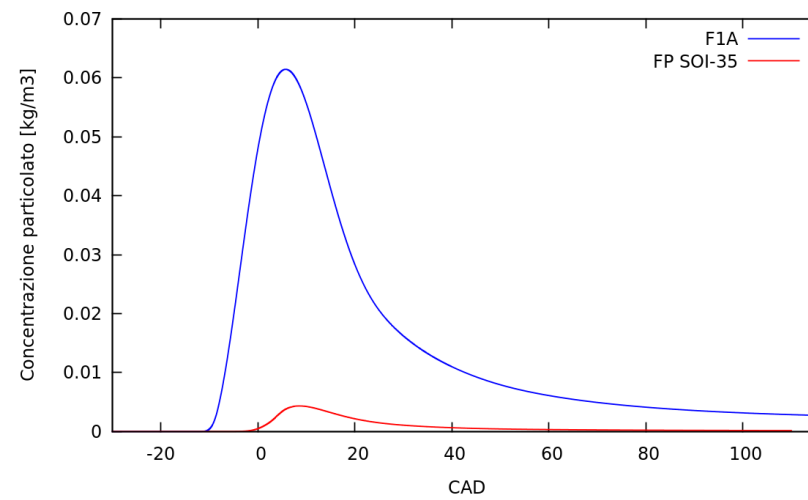


Figura 6.7: Concentrazione del particolato (FP)

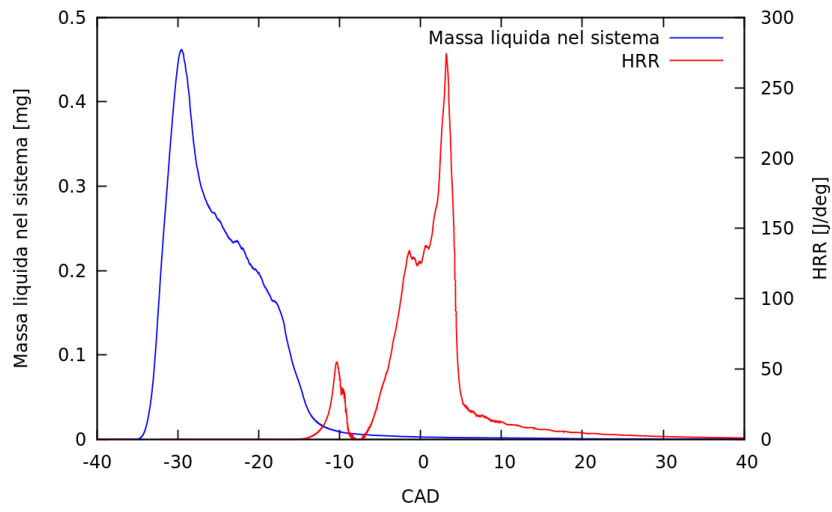


Figura 6.8: Presenza di liquido e HRR (FP)

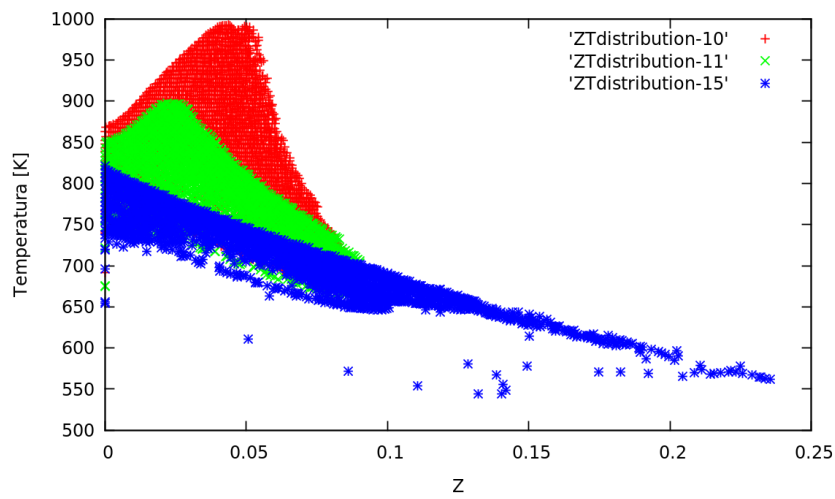


Figura 6.9: Distribuzione Z-T nelle prime fasi (FP)

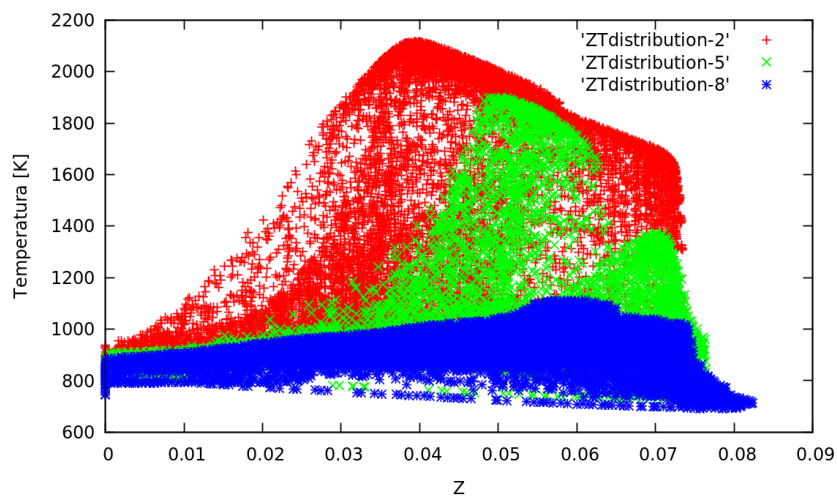


Figura 6.10: Distribuzione Z-T durante la combustione (FP)

**Interazione fra spray e moto di squish** Si è voluto studiare il processo di miscelamento che ha portato ad ottenere una combustione così efficiente nel motore FP. Quello che si è notato è molto interessante, e sottolinea ancora una volta l'importanza degli effetti del moto della carica all'interno del cilindro. Si studia ora la sequenza temporale del campo di moto e della distribuzione di Z all'interno del motore, facendo riferimento alla figura 6.11. In tale figura sono riportate quattro coppie di immagini ottenute visualizzando i risultati della simulazione in *paraview*, ognuna delle quali riferita ad un'istante diverso durante la fase che precede la combustione, con il campo di moto sulla sinistra e la distribuzione di Z sulla destra. Come si è sottolineato nel paragrafo di introduzione di questo motore, l'altezza della zona di squish è stata ridotta rispetto al motore F1A.

Partendo da questa premessa, si analizza ora l'evoluzione del sistema nei seguenti quattro istanti di tempo: -16 CAD, -13 CAD, -8 CAD e -3 CAD. Si descrive lo stato del sistema a -16 CAD, istante in cui l'iniezione è quasi terminata ma l'intensità dello spray è ancora alta. È possibile notare che in questo istante la massa di gas contenuta nella zona di squish si è già messa in movimento. L'intensità dello spray è però molto elevata in questa fase, tanto da bloccare il passaggio di questa massa ed innescare un moto vorticoso nella zona compresa fra lo spray e la zona di squish. La combinazione del trascinamento dello spray e del moto di squish, porta la massa racchiusa fra questi a ruotare su se stessa. Un altro moto vorticoso si viene a formare nella parte fonda della tazza del pistone, innescato da quella parte dello spray che viene deviata verso il basso in seguito all'impatto sul bordo della tazza. La parte del dominio non coinvolta da questi moti vorticosi prosegue indisturbata, con la velocità delle particelle mediamente diretta verso l'alto, in accordo alla direzione di movimento del pistone. Per quanto riguarda la Z, si sottolinea la funzione svolta dal bordo della tazza del pistone, che divide il flusso di combustibili una parte verso l'alto ed una verso il basso. All'istante -13 CAD si può notare invece che, essendo terminato l'atto di iniezione, diminuisce l'intensità dello spray e non è più presente più quell'"ostacolo" che impediva la fuga dei gas dalla zona di squish. Conseguentemente, parte del flusso accelerato dallo squish attraversa la zona dove insisteva lo spray, modificando il campo di moto. La distribuzione di Z, in questo istante, visualizza una grande concentrazione di combustibile nella parte fonda della tazza. Per colpa del movimento del pistone infatti, durante la ultima fase dell'iniezione, non può più essere colpito il bordo della tazza e il combustibile seguirà principalmente la direzione discendente.

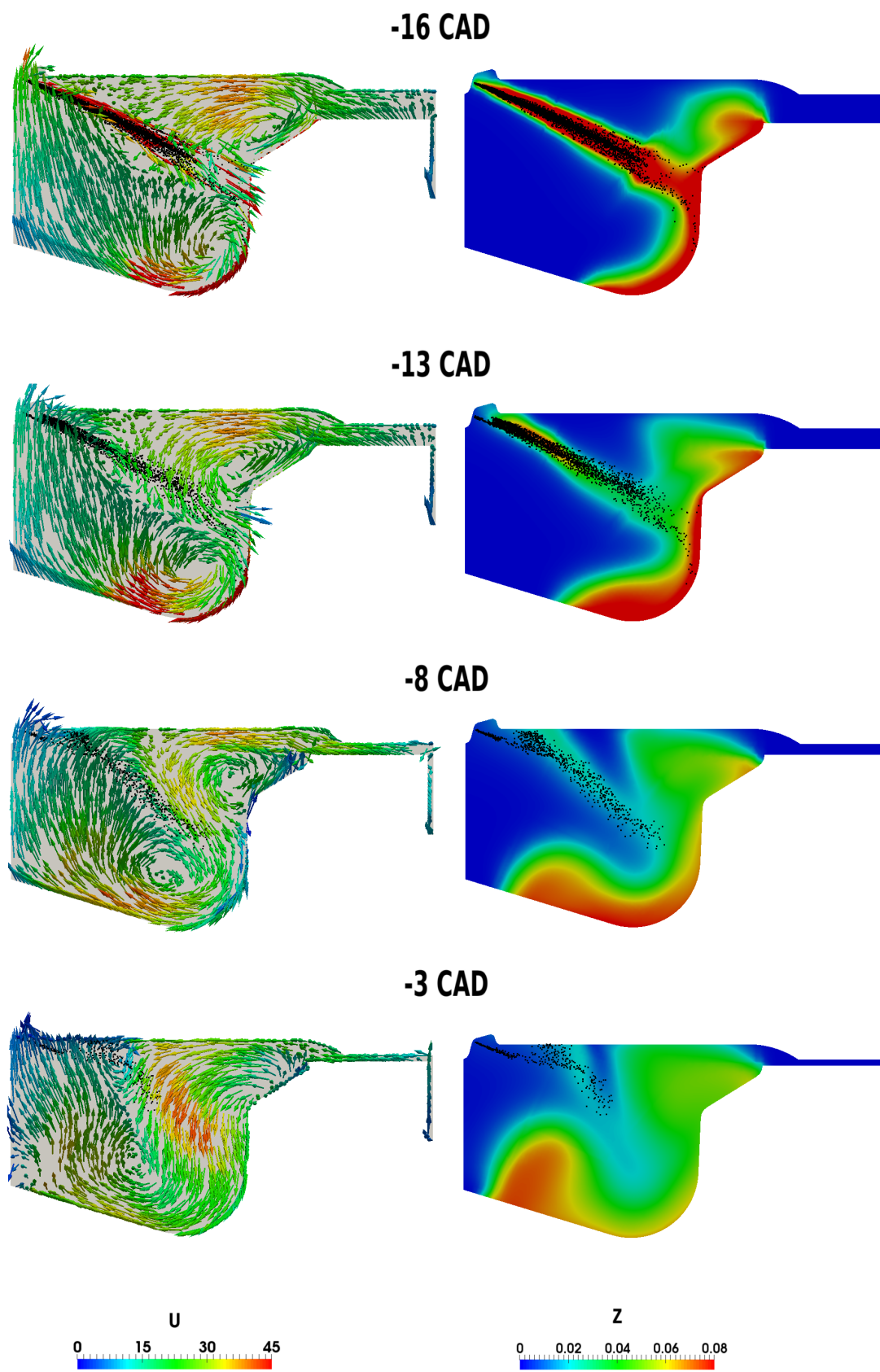


Figura 6.11: Processo di miscelamento nel motore FP (SOI=-35)



All'istante -8 CAD la situazione è più o meno invariata, si può notare però che i moti vorticosi, venutisi a creare precedentemente, stanno cambiando aspetto, prediligendo la discesa dei gas dalla zona di squish verso il fondo della tazza, e poi verso il centro della camera di combustione. Questo permette di “pulire” la parte fonda della tazza dove si era accumulato parecchio combustibile, trascinandolo verso zone dove invece scarseggia.

Il risultato è chiaramente visibile nell'ultima coppia di figure, relative all'istante -3 CAD, in cui si vede chiaramente il percorso preferenziale del gas che fugge dalla zona di squish, e spinge le molecole di combustibile dal fondo della tazza verso il centro della camera, uniformando lentamente la carica. Il risultato di questo processo è il quasi totale premiscelamento del combustibile, che porta ad avere una combustione più pulita ed efficiente di quanto avveniva nel motore F1A.

**Confronto delle prestazioni con il motore F1A** Per terminare l'analisi del motore FP, si confrontano i valori dei parametri introdotti al paragrafo 6.1.2 ottenuti nei due motori:

Confronto delle prestazioni dei motori F1A ed FP

Motore	$L_{gross}$ [J]	$Q_{comb}$ [J]	$Q_{tot}$ [J]	$\eta_{comb}$ [%]	$\xi_{comb}$ [%]	$\eta_{gross}$ [%]	GMEP [bar]	$(\frac{dp}{dt})_{MAX}$ [ $\frac{bar}{ms}$ ]
F1A	528.0	1299.3	1372.3	40.64	94.68	38.48	9.24	224.7
FP	702.1	1609.0	1627.9	43.64	98.84	43.13	9.37	201.6

Si noti il consistente miglioramento di  $\xi_{comb}$  fra i due motori, che porta a rilasciare circa il 4% in più del calore disponibile. Non è solo il miglior livello di completamento delle reazioni di ossidazione a rendere più efficiente il processo, perchè il confronto dei valori  $\eta_{comb}$  indica che la conversione dell'energia termica in lavoro è più efficiente nel secondo motore. Questo è dovuto, come anticipato precedentemente, ad una migliore “tempistica” dell'accensione, che avvenendo quasi in corrispondenza del TDC non contribuisce ad aumentare il lavoro di compressione, a differenza di quello che succedeva nel motore F1A.

Si vuole sottolineare che i due motori effettivamente lavorano ad un simile livello di carico, aspetto confermato dal valore della GMEP ottenuta. L'ultimo aspetto che rende il motore FP migliore dell'F1A si può comprendere confrontando i valori del gradiente massimo di pressione. Una riduzione di tale valore dovrebbe tradursi in un motore meno rumoroso. Per i motori Diesel per autotrazione, il limite di riferimento per il gradiente di pressione è pari a 80 [bar/ms] [34]. Il valore riscontrato è decisamente più alto di questo valore limite; di conseguenza si conclude che entrambi i motori PCCI considerati sono molto più rumorosi di un normale motore di piccola taglia.

### 6.2.2 Funzionamento in modalità Diesel

È importante verificare che questo motore possa veramente funzionare in modalità Diesel. Per simulare una combustione di tipo Diesel, è necessario ritardare l'iniezione di combustibile rispetto al caso PCCI. Si è deciso di impostare SOI al valore di -10 CAD, mantenendo invariata la legge di iniezione (iniezione singola di durata pari a circa 20 CAD). È necessario effettuare un'ulteriore modifica rispetto al caso PCCI, che consiste nella riduzione del grado di ricircolo dei gas combusti; viceversa la combustione generata risulterebbe incompleta, generando poco lavoro ed emettendo grandi quantità di incombusti. Si è scelto di operare con lo stesso grado di ricircolo con cui opera il motore F1C, pertanto si sono utilizzate le stesse frazioni massiche di ossigeno, azoto, acqua ed anidride carbonica per inizializzare il caso FP Diesel. Cambiando la composizione della carica rispetto al caso FP PCCI, diventa necessario simulare una nuova fase di compressione, il cui risultato finale sarà utilizzato per inizializzare il caso di combustione per l'FP Diesel. In figura 6.12 si possono confrontare i profili di pressione ottenuti con il motore F1C e con il motore FP, sia in modalità PCCI che in modalità Diesel. Questo confronto permette di apprezzare la diversa forma del profilo di pressione ottenuto nelle due modalità. Si può notare che in modalità PCCI la combustione più intensa e veloce genera un maggiore picco di pressione. In modalità Diesel invece (F1C e FP Diesel), la combustione è più graduale, si genera quindi un profilo di pressione più "dolce" e meno appuntito. Non deve insospettire il fatto che la curva relativa al motore F1C raggiunga dei valori di pressione molto più elevati rispetto all'FP Diesel. Il motore F1C infatti lavora ad una diversa condizione di carico, descritta da una più alta quantità di combustibile immessa e quindi una crescita più intensa della pressione. Inoltre si fa notare che i motori hanno un valore diverso del rapporto di compressione, e che il valore di pressione all'IVC per il motore F1C è maggiore di quello del motore FP. Si analizza ora la curva del rilascio di calore generata, visibile in figura 6.13. Utilizzando una singola iniezione, in modalità Diesel, diventa molto visibile la fase di combustione premiscelata. È infatti presente un picco di rilascio del calore, che precede la fase della combustione *mixing-controlled*. Questo picco, come già spiegato al capitolo precedente, non è particolarmente visibile nel motore F1C per effetto delle iniezioni pilota. Si noti comunque che sia la curva relativa al motore F1C che quella relativa all'FP Diesel, presentano un valore massimo di rilascio del calore pari a circa la metà di quello ottenuto in modalità FP PCCI. Nella seguente tabella vengono confrontate le prestazioni del motore F1C con quella del motore FP, sia in condizione Diesel (FPD) che in condizione PCCI (FPP).

Confronto delle prestazioni dei motori F1C, FP Diesel ed FP PCCI

Motore	$L_{gross}$ [J]	$Q_{comb}$ [J]	$Q_{tot}$ [J]	$\eta_{comb}$ [%]	$\xi_{comb}$ [%]	$\eta_{gross}$ [%]	GMEP [bar]	$(\frac{dp}{dt})_{MAX}$ [ $\frac{bar}{ms}$ ]
F1C	1006.9	2463.9	2579.1	40.87	95.53	39.04	13.44	93.6
FPD	604.8	1483.0	1627.9	40.78	91.10	37.15	8.07	119.2
FPP	702.1	1609.0	1627.9	43.64	98.84	43.13	9.37	201.6

Si mettono in evidenza i due valori di  $\eta_{comb}$  ottenuti nei due casi di combustione Diesel, molto simili tra di loro, ed entrambi inferiori a quello ottenuto nel caso di combustione PCCI. Questo risultato dimostra ancora una volta che la combustione PCCI è un processo molto efficiente. Si nota inoltre che il valore di  $\xi_{comb}$  ottenuto in modalità FP Diesel non è elevato, ed è segno di un incompleto processo di combustione, causato probabilmente dalle inferiori temperature raggiunte o da insufficiente miscelamento con l'ossigeno. È interessante confrontare il gradiente di pressione massimo ottenuto nei tre motori; si può notare che tale valore aumenta di pari passo con il livello di premiscelamento raggiunto dalla carica. Nel motore F1C infatti, per effetto delle iniezioni pilota, viene ridotto il ritardo d'accensione e non si ottiene mai una gran quantità di combustibile premiscelato, evitando rilasci di calore molto intensi che si traducono picchi di pressione elevati. Nel risultato riguardante la condizione FP Diesel, il picco di pressione si ottiene proprio in corrispondenza della fase di combustione premiscelata, in cui si ottiene il picco di rilascio del calore. Il valore più alto in assoluto viene tuttavia messo in mostra dal motore PCCI. Si mette in evidenza quindi un problema: elevato premiscelamento significa alta efficienza, ma significa anche rumorosità.

Nelle figure 6.15, 6.16 e 6.17 si può apprezzare come variano le emissioni di inquinanti fra la modalità PCCI e Diesel, e si può inoltre confrontare il risultato ottenuto nel motore FP con quello del motore F1C (a tale scopo si ricordi che i due motori lavorano ad un carico diverso). La riduzione dell'EGR, dalla modalità PCCI a quella Diesel, provoca un aumento considerevole degli ossidi di azoto prodotti. Il minor grado di premiscelamento ottenuto spiega in gran parte l'aumento della produzione di particolato. Tuttavia, la produzione di particolato e di CO nel motore FP è elevata se relazionata alla condizione di carico. Questi due fattori sono probabilmente indice di un processo non ottimizzato, che genera alcune zone molto ricche di combustibile, in cui le alte temperature e la scarsità di ossigeno portano ad una elevata produzione di questi inquinanti.

Il risultato ottenuto si può comunque considerare accettabile, ed è la prova che il motore FP può funzionare anche in modalità Diesel, variando opportunamente il SOI ed il grado di apertura della valvola EGR. Si ritiene che questo risultato sia migliorabile, sia in termini di completezza della combustione, sia di produzione di inquinanti, sia di rumorosità. Adottare una strategia ad iniezioni multiple, come quella del motore F1C, potrebbe portare miglioramenti su ognuno di questi fronti. Non essendo però l'oggetto di studio di questa tesi, non si è approfondito tale discorso.

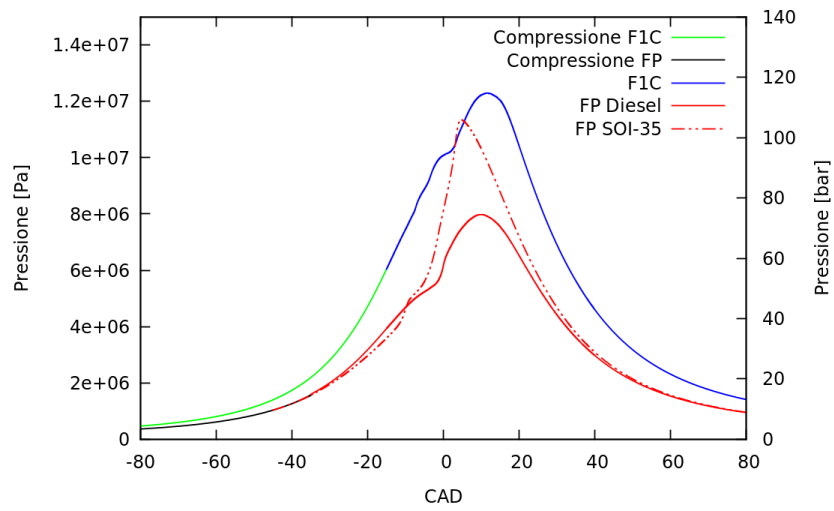


Figura 6.12: Profilo di pressione in modalità PCCI e Diesel (FP)

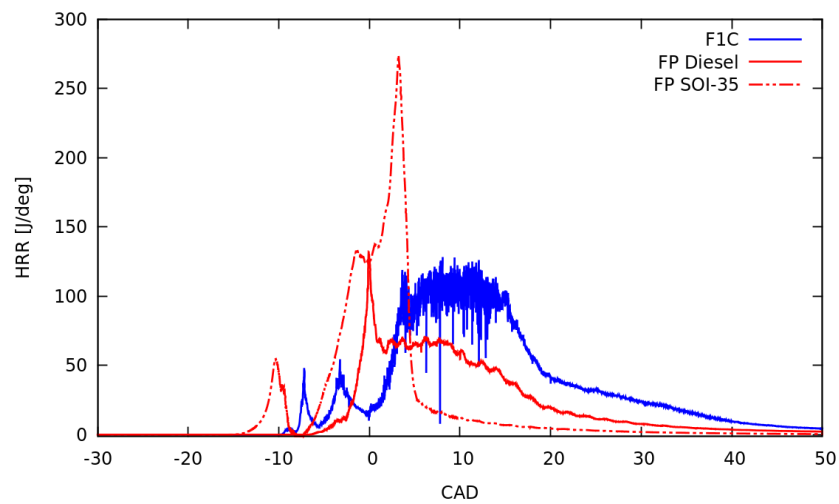


Figura 6.13: Rilascio del calore in modalità PCCI e Diesel (FP)

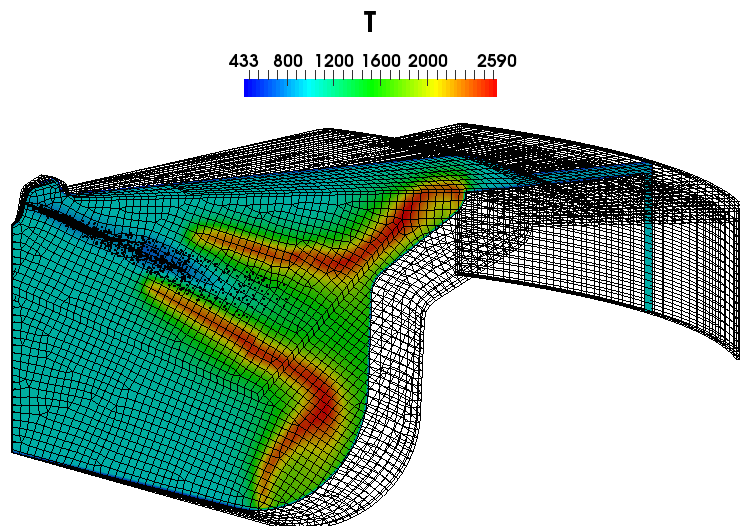


Figura 6.14: Combustione Diesel nel motore FP

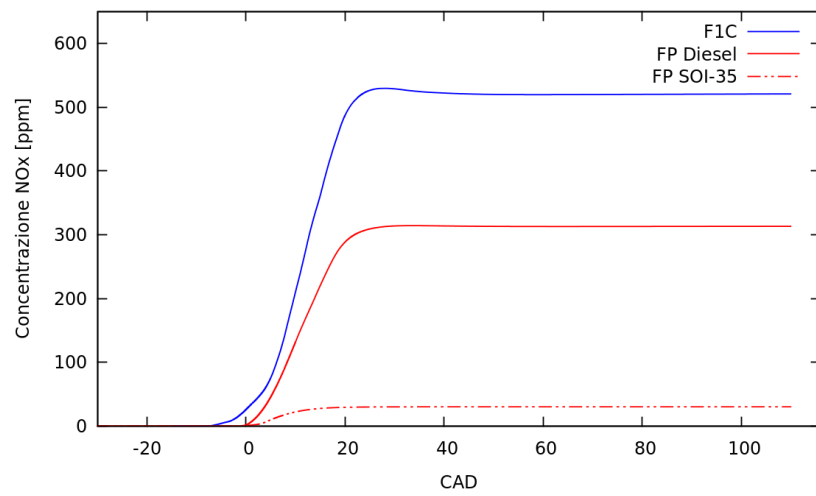


Figura 6.15: Concentrazione degli ossidi di azoto (FP Diesel)

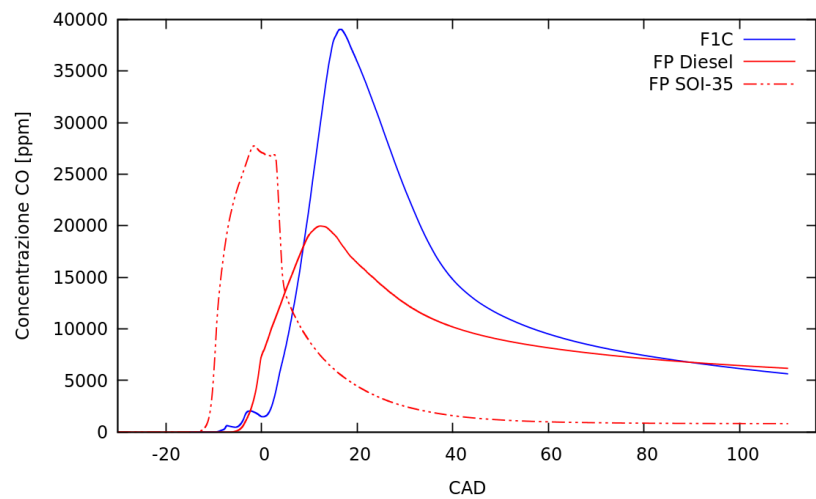


Figura 6.16: Concentrazione del monossido di carbonio (FP Diesel))

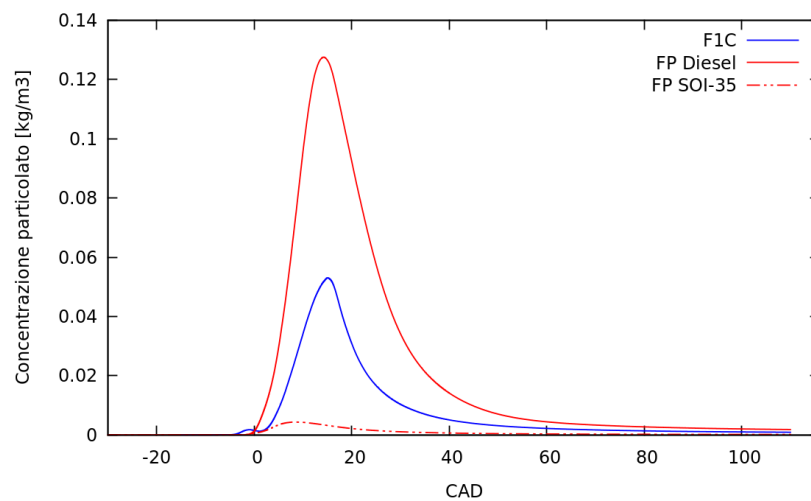


Figura 6.17: Concentrazione di particolato (FP Diesel)

## 6.3 Analisi del funzionamento al variare dei parametri operativi

Nei paragrafi precedenti si sono testate due condizioni operative (PCCI e Diesel). I risultati ottenuti si sono dimostrati promettenti, indicando che il funzionamento duale potrebbe essere una buona soluzione per beneficiare dei vantaggi offerti dalla combustione PCCI, in quelle condizioni operative in cui questa è sostenibile. I motori PCCI sono tuttavia una tecnologia recente, pertanto sono ancora da esplorare quelle strategie di controllo necessarie per ottenere dei buoni risultati in tutto il campo di funzionamento. Si è utilizzato ancora una volta il solutore CCM per simulare la combustione nel motore FP, questa volta non per testare specifiche condizioni operative, ma per capire l'influenza delle variabili di controllo sul risultato finale.

### 6.3.1 Effetto della variazione del SOI

In un MCI ad iniezione diretta, variare il momento di iniezione del combustibile (SOI) è un'operazione semplice e su cui si ha un controllo efficace. Pertanto, questa è stata la prima cosa su cui si è indagato, al fine di capire se potesse essere una strategia di controllo per il motore FP.

Si è sottolineata più volte l'importanza di direzionare correttamente lo spray nei motori PCCI. Variando il momento di iniezione, risulta chiaro che varia anche come lo spray impatta sulle pareti della camera e come di conseguenza il combustibile si distribuisce. Si premette che nei risultati presentati in questo capitolo non si riporterà per nessun caso studiato la relativa produzione di ossidi di azoto. Infatti, in modalità PCCI il valore finale di concentrazione è sempre molto basso, e non costituisce un parametro di fondamentale importanza per la valutazione del risultato. Inizialmente si è voluta studiare la risposta del motore a fronte di una piccola variazione del SOI. In figura 6.18a si confrontano i profili di pressione ottenuti variando di  $\pm 3$  CAD il SOI rispetto al valore di riferimento (-35 CAD). I risultati sono abbastanza simili, sia nel ritardo d'accensione mostrato sia nella pressione massima raggiunta. Per apprezzare meglio le differenze fra questi tre casi si faccia riferimento ai diagrammi riportati in figura 6.20. Si vuole sottolineare il più basso valore di completezza dell'ossidazione  $\xi_{comb}$  raggiunto nella simulazione SOI-32. Questo si spiega analizzando la distribuzione di Z in figura 6.18b, relativa all'istante -5 CAD, poco prima dell'inizio della combustione. La distribuzione relativa alla simulazione SOI-32 mostra una maggior concentrazione di combustibile nella parte fonda della tazza, ad indicare che il processo di miscelamento non è efficiente come negli altri due casi. In particolare, come conseguenza dell'iniezione ritardata, lo spray non colpisce più il bordo superiore della tazza del pistone ma la sua parete laterale. Questo farà deviare il combustibile verso il fondo della tazza,

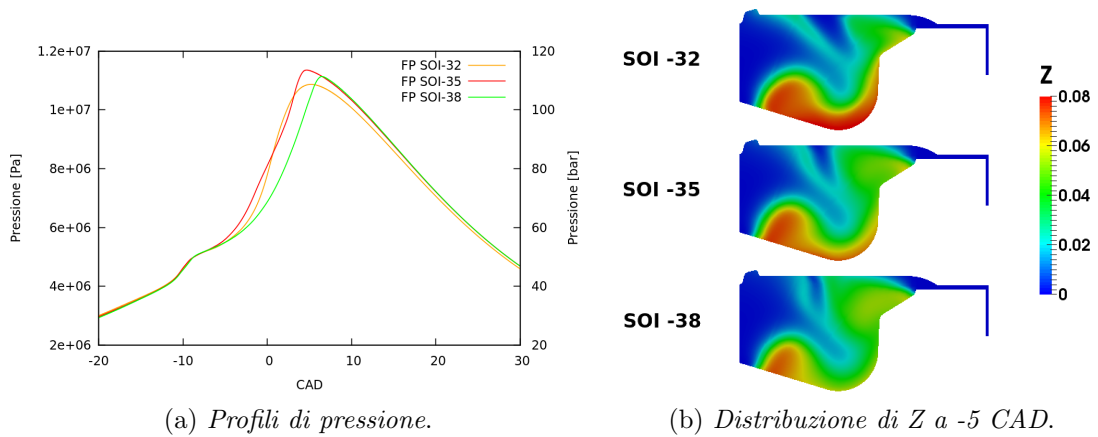


Figura 6.18: Risultati ottenuti variando il SOI nell'intorno del valore di riferimento (FP)

comportando che una minore frazione di combustibile venga deviata verso la zona di squish. La zona troppo ricca venutasi a formare in corrispondenza della parte fonda della tazza porta ad avere una combustione incompleta, come conseguenza del basso contenuto locale di ossigeno. Inoltre, in figura 6.20b e 6.20d si possono notare dei valori di produzione di CO e di particolato molto più alti rispetto a quelli messi in mostra dalle simulazioni SOI-38 e SOI-35. Utilizzando quindi un SOI pari a -32 CAD, si evidenzia una riduzione dell'efficienza del processo di miscelamento.

Si valuta ora il risultato ottenuto dalla simulazione SOI-38 confrontandolo con quella di SOI-35. Si può notare come i valori di  $\xi_{comb}$ ,  $\eta_{comb}$  e  $\eta_{gross}$  siano allineati fra le due, suggerendo che il processo sia molto efficiente in entrambi i casi. Le differenze più grandi si notano nel confronto delle emissioni di CO e di particolato. Il CO risulta essere più alto per la simulazione SOI-38, il particolato invece è più alto per la simulazione SOI-35. Fra le due possibilità, si potrebbe preferire di avere un' inferiore concentrazione di particolato nei gas di scarico, cosa che potrebbe consentire eventualmente di non utilizzare un filtro DPF; seguendo questa scelta, il CO potrebbe essere efficacemente abbattuto con l'uso di un catalizzatore ossidante. Più importante di quanto confrontato fino ad ora, il  $\frac{dp}{dt}_{max}$  ottenuto nella simulazione SOI-38 evidenzia una consistente riduzione in confronto alla simulazione SOI-35. Si conclude che -38 è il valore di SOI da preferire per questo motore, giustificato da un'ottima efficienza della combustione, ridotta produzione di particolato e minore rumorosità di combustione.

Successivamente si è studiata la risposta del motore a fronte di una grande variazione del SOI. In figura 6.19 si possono confrontare i risultati ottenuti andando sia nella direzione di iniezioni anticipate (-50 CAD) sia ritardate (-15 CAD).

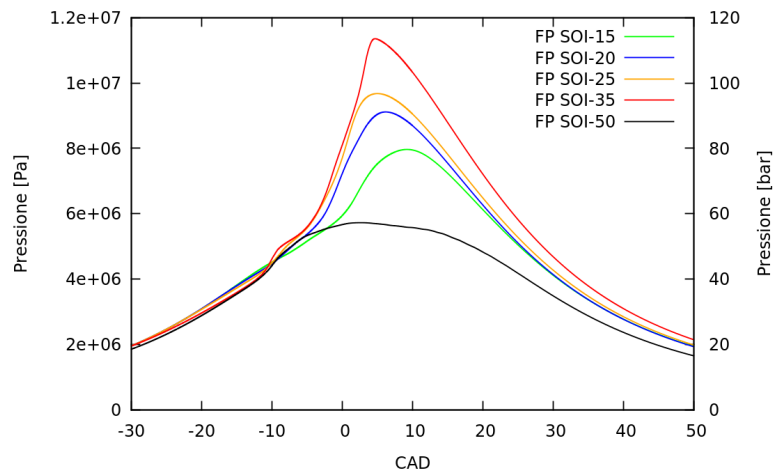


Figura 6.19: Influenza di una grande variazione di SOI (FP)

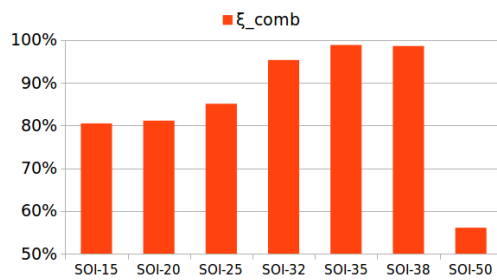
Si può notare che la simulazione SOI-50 visualizza una crescita di pressione molto ridotta durante la fase di combustione. Il valore di  $\xi_{comb}$  riportato in figura 6.20a per questa simulazione indica che la combustione è avvenuta in maniera molto incompleta. Come descritto al paragrafo 2.2, iniziando l'immissione di combustibile con molto anticipo, lo spray non si dirige verso il bordo della tazza del pistone ma verso la parete del cilindro. In questi casi si provoca l'accumulo di combustibile liquido e si rallenta il processo di evaporazione. L'adozione di SOI=-50 CAD nel motore FP ha evidenziato questo tipo di comportamento.

Tuttavia, anche le iniezioni ritardate mostrano un certo livello di incompletezza delle reazioni di ossidazione (6.20a). Più si ritarda l'iniezione, più ci si avvicina infatti ad una combustione di tipo Diesel, con parte del combustibile che brucia in maniera diffusiva; mantenendo però elevato il grado di ricircolo dei gas combusti, la bassa concentrazione di ossigeno limita il processo. Si vuole sottolineare che nessuna di queste simulazioni ha mostrato dei risultati accettabili: bassi valori di  $\eta_{gross}$ , elevata produzione di CO, elevata produzione di particolato, . . . .

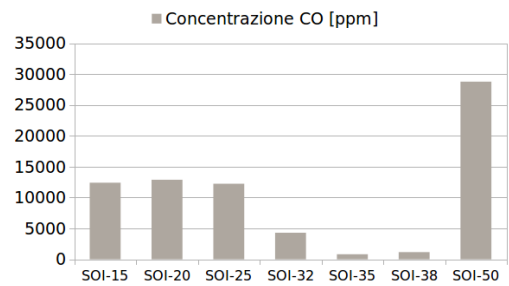
Purtroppo, in questo motore, non sembra possibile trovare altre condizioni di funzionamento efficienti variando solamente il valore di SOI. Per valori di SOI anticipati infatti si arriva a bagnare il cilindro, per valori di SOI ritardati invece si visualizza un eccessivo accumulo di combustibile nella parte fonda della tazza del pistone, che agli alti valori di EGR utilizzati comporta incompletezza delle reazioni di ossidazione.

Per migliorare il funzionamento in tali condizioni, si evidenzia la necessità di prendere degli accorgimenti aggiuntivi .

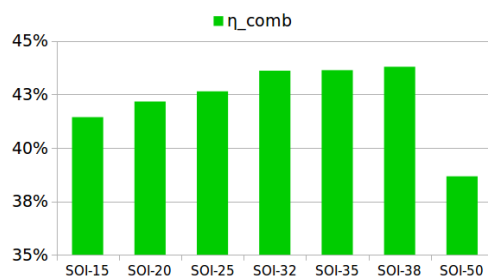




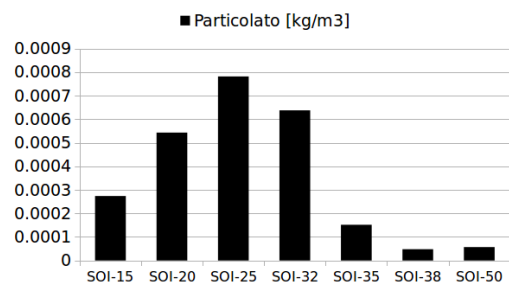
(a) Completezza dell'ossidazione.



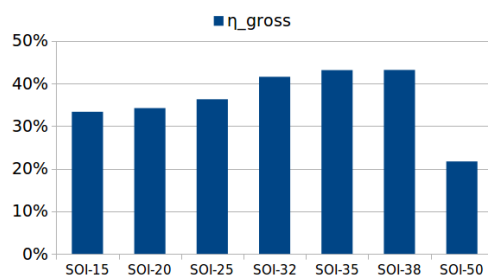
(b) Produzione di CO.



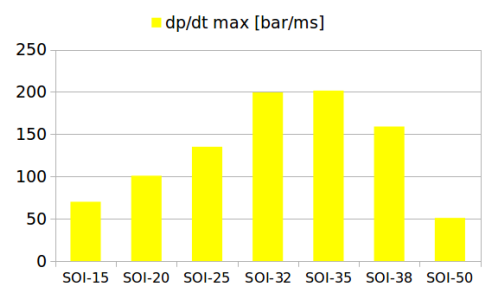
(c) Efficienza di combustione.



(d) Produzione di particolato.



(e) Efficienza globale.



(f) Gradiente di pressione massimo.

Figura 6.20: Confronto delle prestazioni del motore FP al variare del SOI

### 6.3.2 Influenza dell'inclinazione dello spray

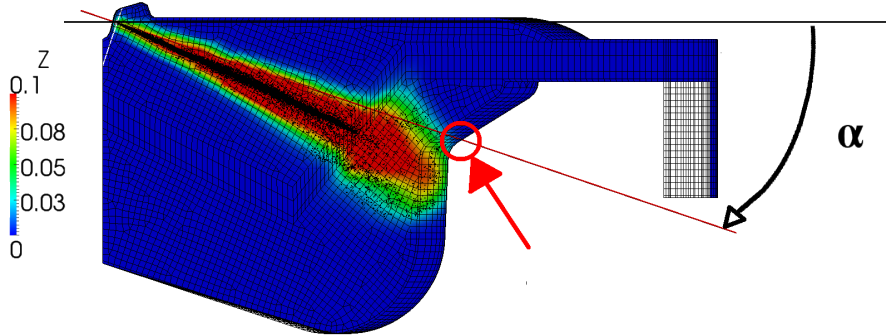


Figura 6.21: Correzione dell'inclinazione dello spray per ristabilire il punto di impatto sul bordo della tazza del pistone

Avendo dimostrato più volte l'importanza di un corretto orientamento dello spray, si è provato a migliorare l'efficienza di queste combustioni incomplete ripristinando il bordo della tazza come punto di impatto. I risultati mostrati nei paragrafi precedenti sono stati ottenuti mantenendo invariata l'inclinazione dello spray. Nel motore FP è previsto l'utilizzo di un iniettore con angolo di apertura dello spray di 130 gradi, quindi l'angolo di inclinazione dalla direzione orizzontale  $\alpha$  vale 25 gradi. Grazie all'utilizzo dello software *Paraview*, si è valutata l'inclinazione che lo spray dovrebbe avere per colpire questo specifico punto quando si utilizzano SOI non ottimali (figura 6.21).

Sono state ripetute le simulazioni SOI-50, SOI-25 e SOI-15, impostando per ognuna un opportuno valore di inclinazione per lo spray.

I valori utilizzati sono i seguenti:

SOI-50	$\alpha = 40^\circ$
SOI-25	$\alpha = 21^\circ$
SOI-15	$\alpha = 19^\circ$

I risultati ottenuti utilizzando questi valori, vengono confrontati in figura 6.22 con quelli ottenuti ad angolo di inclinazione fisso, di cui si era discusso al capitolo precedente. I nuovi risultati sono contrassegnati dalla lettera T finale, e sono disegnati con linea tratto-punto. Si può notare che in tutti i casi presi in considerazione, ripristinare il *targeting* corretto permette di migliorare il risultato ottenuto. Si noti soprattutto come la simulazione SOI-50 restituisca un profilo di pressione molto simile a quello visto per la simulazione SOI-35.

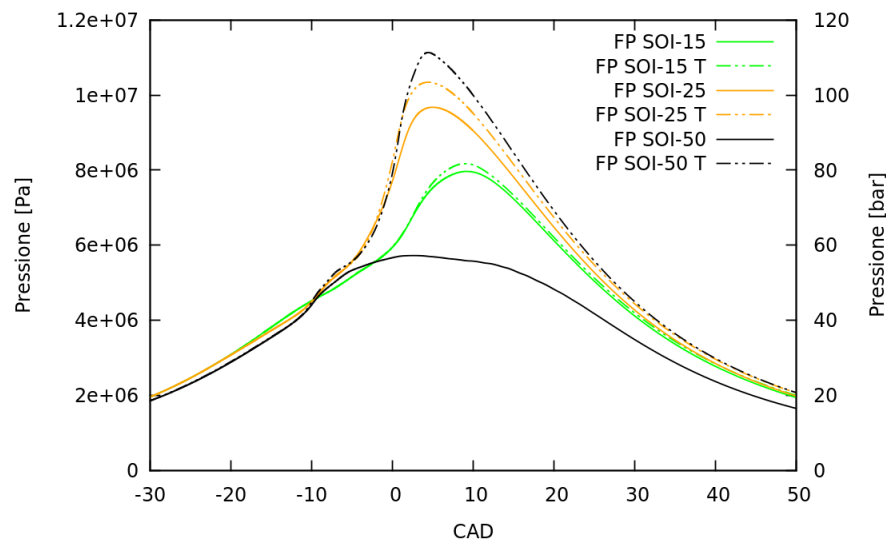
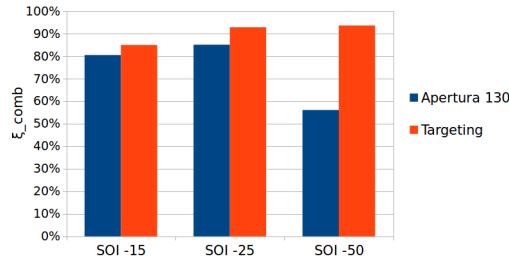


Figura 6.22: Profili di pressione al variare del targeting (FP)

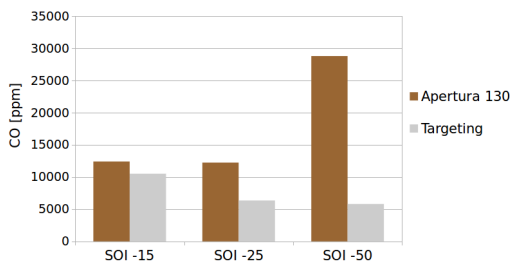
Analizzando la figura 6.23a, si può notare come la correzione del *targeting* sia veramente importante al fine di ottenere un buon miscelamento e quindi una combustione completa. In figura 6.23c si può notare che per la simulazione SOI-50 la concentrazione di particolato aumenta con la correzione del *targeting*, questo è dovuto principalmente ad un aumento delle temperature massime ed alla presenza di particelle liquide che, per colpa dell'iniezione molto anticipata, si accumulano nel sistema ritardando l'evaporazione. Tuttavia, si evidenzia che il beneficio ottenuto si riduce gradualmente passando da iniezioni anticipate (-50 CAD) a iniezioni ritardate (-15 CAD). Nella simulazione con SOI-15 si è riusciti ad ottenere solo un modesto valore di  $\eta_{comb}$ , pari circa all'85%. Pertanto la strategia di modificare il *targeting*, non si dimostra completamente efficace quando l'iniezione avviene in prossimità del TDC. In tale caso, quando il combustibile colpisce il bordo della tazza e viene diviso nei due flussi, la parte che viene deviata verso l'alto trova poco spazio per miscelarsi e creare una carica sufficientemente uniforme. La combustione così generata risulta inevitabilmente incompleta. Nei prossimi paragrafi si cercherà di risolvere questo problema, utilizzando diverse strategie per permettere un buon miscelamento anche con iniezioni ritardate.

I risultati ottenuti da questo studio suggeriscono che sarebbe necessario poter controllare dinamicamente il valore di inclinazione dello spray al fine di poter ottenere una combustione efficiente, qualunque sia il valore di SOI adoperato. Tuttavia questo non è possibile con gli iniettori utilizzati negli attuali motori Diesel. Sono stati condotti alcuni studi riguardo l'utilizzo delle strategie di iniezione adattive (AIS: *Adaptive Injection Strategies*) per l'ottimizzazione del processo di iniezione [35]. Non si può però avere la certezza che questi dispositivi vengano realmente

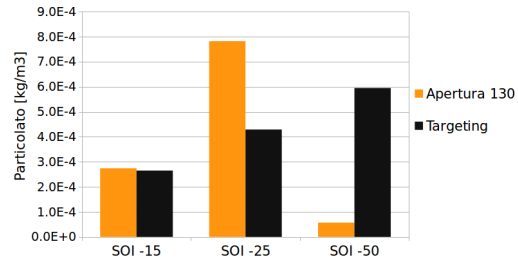
messi in commercio. Questo potrebbe limitare il campo di funzionamento in cui un motore può ottenere efficacemente una combustione PCCI. Nello scenario più sfavorevole si potrebbe concludere che la combustione PCCI sia applicabile solo a motori che funzionano in condizioni stazionarie.



(a) *Efficienza di combustione.*



(b) *Produzione di CO.*



(c) *Produzione di particolato.*

Figura 6.23: Variazione di efficienza di combustione, produzione di CO e particolato al variare del targeting (FP)

### 6.3.3 Influenza degli altri parametri operativi

Per ottenere un buon livello di completamento dell'ossidazione anche in caso di iniezioni ritardate, sono state provate due diverse strategie. Il problema più grande in questi casi è costituito dalla difficoltà nel miscelamento del combustibile. Infatti si riduce il tempo a disposizione per tale processo, inoltre la geometria non viene in aiuto come nel caso in cui lo spray colpisca il bordo della tazza del pistone. Questo porta alla formazione di zone troppo ricche, dove per colpa della scarsità di ossigeno non si arriva al completamento delle reazioni di ossidazione. In questi casi si è provato a migliorare il risultato seguendo due vie: la riduzione dell'EGR, al fine di aumentare la disponibilità di ossigeno nella carica e quindi favorire il processo di ossidazione, e l'aumento della temperatura del combustibile, per facilitare l'evaporazione e quindi il processo di miscelamento. In entrambi i casi si è lasciata invariata l'inclinazione dello spray ( $\alpha = 25^\circ$ ), permettendo così di valutare singolarmente l'effetto di ogni strategia adottata.

La riduzione del grado di ricircolo dei gas combusti dovrebbe essere tale da garantire un processo di combustione sufficientemente completo, ed allo stesso tempo non causare una eccessiva produzione di ossidi di azoto. Non è semplice capire quale sia, per ogni valore di SOI, il corrispettivo valore di EGR che permette di ottenere quanto sperato. Si è provato a migliorare  $\xi_{comb}$  ottenuto nella simulazione SOI-25 riducendo l'EGR dal 49 % al 40%.

Tale modifica si è ottenuta variando le frazioni massiche delle specie all'IVC:

$Y_{O_2}$	0.15390
$Y_{CO_2}$	0.06614
$Y_{H_2O}$	0.02931
$Y_{N_2}$	0.75066

con le quali è stato generato un nuovo caso; di questo caso sono state simulate poi le fasi di compressione e combustione.

È stato poi simulato un ulteriore caso, nel quale la temperatura del combustibile è stata variata da 313 [K] a 423 [K]. In questa simulazione EGR e  $\alpha$  non sono stati variati rispetto al caso base (49% e 25°). Si è aumentata la temperatura del combustibile con l'idea di favorire l'evaporazione, migliorando di conseguenza il processo di miscelamento. I due risultati ottenuti sono riportati in figura 6.24, insieme ai due risultati già discussi nel precedente paragrafo (SOI-25 e SOI-25 T).

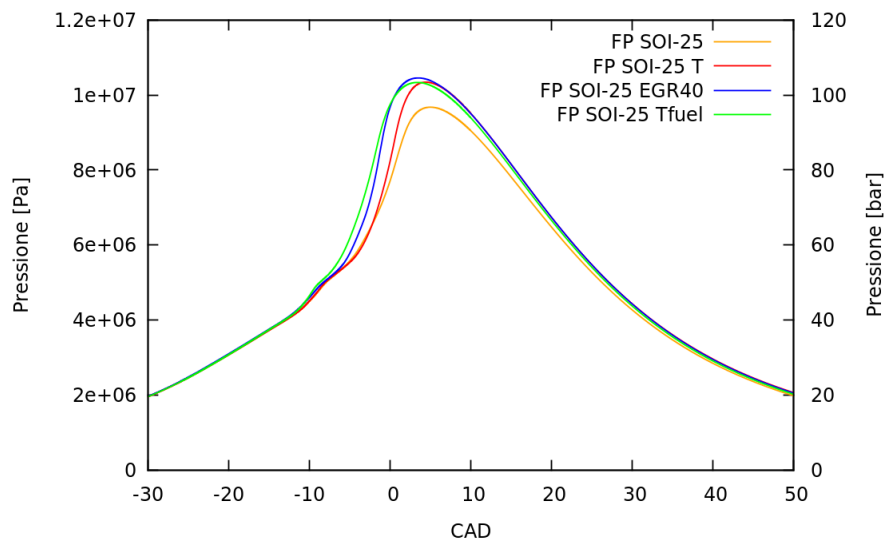
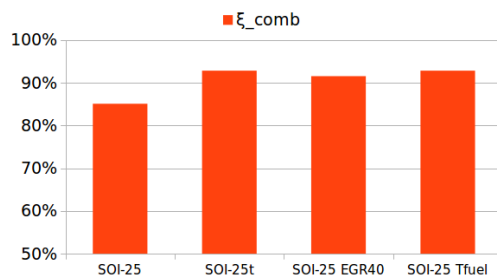


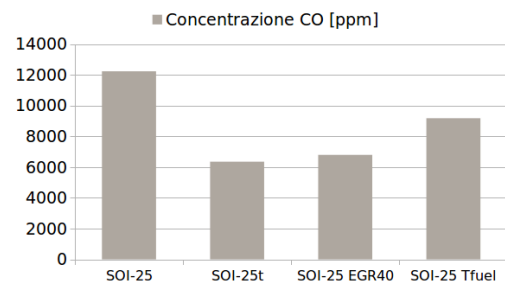
Figura 6.24: Effetto della variazione dello spray e della riduzione dell'EGR (FP)

Sia la riduzione dell'EGR che l'aumento della temperatura del combustibile

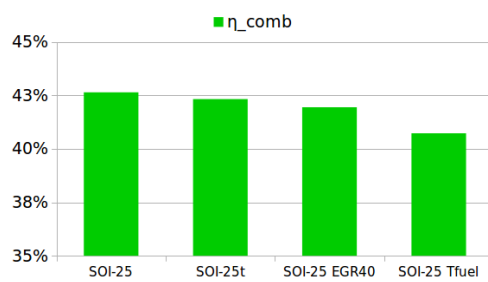
evidenziano un aumento del picco massimo di pressione rispetto al caso base (FP SOI-25). Questa differenza non è sufficiente per dire a priori quale sia la strategia più efficiente, è quindi necessario valutare il lavoro ottenuto in ognuno di questi casi. In figura 6.25 si confrontano i risultati ottenuti nel caso base con quelli ottenuti variando il *targeting*, l'EGR e la temperatura del combustibile. L'analisi dei grafici a barre ci permette di apprezzare che sia la riduzione dell'EGR che l'aumento della temperatura del combustibile hanno avuto un effetto benefico su  $\xi_{comb}$  (fig. 6.25a). Si evidenzia però che entrambe queste soluzioni hanno provocato una riduzione del ritardo d'accensione (fig. 6.24), comportando un aumento del lavoro di compressione ed una conseguente riduzione dell'efficienza di combustione  $\eta_{comb}$ . Il valore finale di  $\eta_{gross}$  ottenuto nei due casi è molto simile. Si passa quindi all'analisi della concentrazione finale di inquinanti e del rumore di combustione (figure 6.25b, 6.25d e 6.25f). Le due strategie mostrano un comportamento simile anche in questo caso, con la riduzione dell'EGR che visualizza un inferiore valore finale di monossido di carbonio, e l'aumento della temperatura del combustibile che al contrario mostra una inferiore produzione di particolato. Tuttavia, come si può notare negli stessi grafici a barre di figura 6.25, la correzione del *targeting* rimane la strategia più efficace. In conclusione, si è dimostrato che la variazione di parametri quali l'EGR o la temperatura del combustibile permette di ottenere una combustione più completa rispetto al caso base. Queste strategie, se applicate singolarmente, non presentano la stessa efficacia della correzione del *targeting* quando si utilizza un valore di SOI pari a -25 CAD. Si potrebbe eventualmente pensare di utilizzare queste strategie in maniera congiunta, al fine di ottenere un risultato complessivamente migliore. A tal fine si evidenzia la necessità di condurre ulteriori studi.



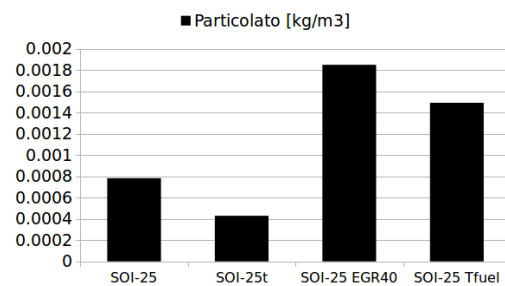
(a) Completezza dell'ossidazione.



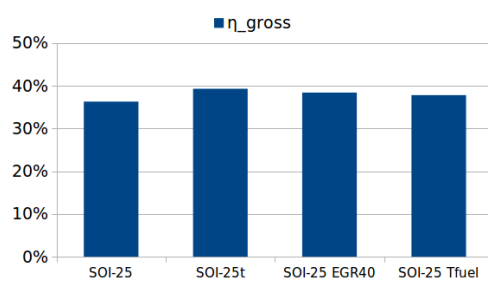
(b) Produzione di CO.



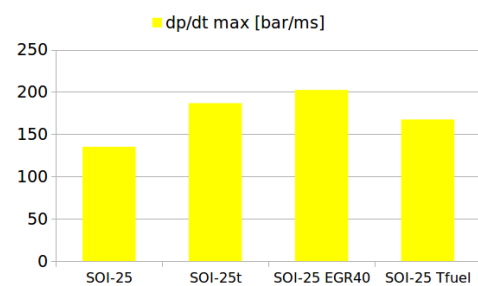
(c) Efficienza di combustione.



(d) Produzione di particolato.



(e) Efficienza globale.



(f) Gradiente di pressione massimo.

Figura 6.25: Confronto delle prestazioni del motore FP al variare del SOI

### 6.3.4 Iniezioni multiple

Si è voluto infine studiare la risposta del motore all'utilizzo di iniezioni multiple. In particolare, si è voluta testare una strategia proposta da Khanh Cung [12], che consiste nell'utilizzo di iniezioni successive di breve durata al fine di ridurre la penetrazione dei singoli spray, limitando così quantità di liquido che colpisce il pistone. Così facendo si dovrebbe promuovere il processo di evaporazione ed ottenere una più uniforme distribuzione del combustibile all'interno della carica. Come suggerito in [12], le iniezioni più ritardate nel tempo trovano una massa di gas con una maggiore densità, pertanto la penetrazione è inferiore in questi casi, e si ha la possibilità di iniettare più a lungo prima che il liquido arrivi ad impattare sul pistone.

In accordo a quanto premesso si è utilizzata la seguente strategia di iniezione: SOI a -40, -33 e -26 CAD con ripartizione 20%, 30% e 50% su base massica. La legge di iniezione risultante è raffigurata in figura 6.26, dove viene confrontata con la legge di iniezione utilizzata della simulazione FP SOI-35. Si può notare che con la strategia di iniezione multipla, l'immissione di combustibile inizia con 5 gradi di anticipo rispetto a quella singola. In entrambi i casi l'immissione di combustibile cessa all'incirca nello stesso istante. Di conseguenza, quello che ci si aspetta è una migliore distribuzione del combustibile nel caso di iniezione tripla. I profili di pressione ottenuti con queste due leggi di iniezione sono riportati in figura 6.27. Si può notare che il picco di pressione è simile nei due casi, pertanto è necessario studiare i parametri di efficienza per valutare quale sia il migliore.

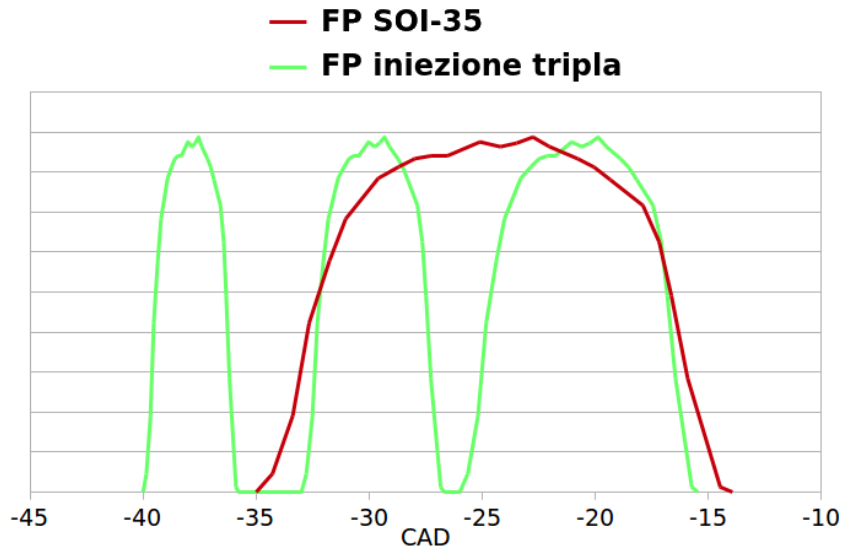


Figura 6.26: Legge di iniezione singola e legge di iniezione tripla (FP)



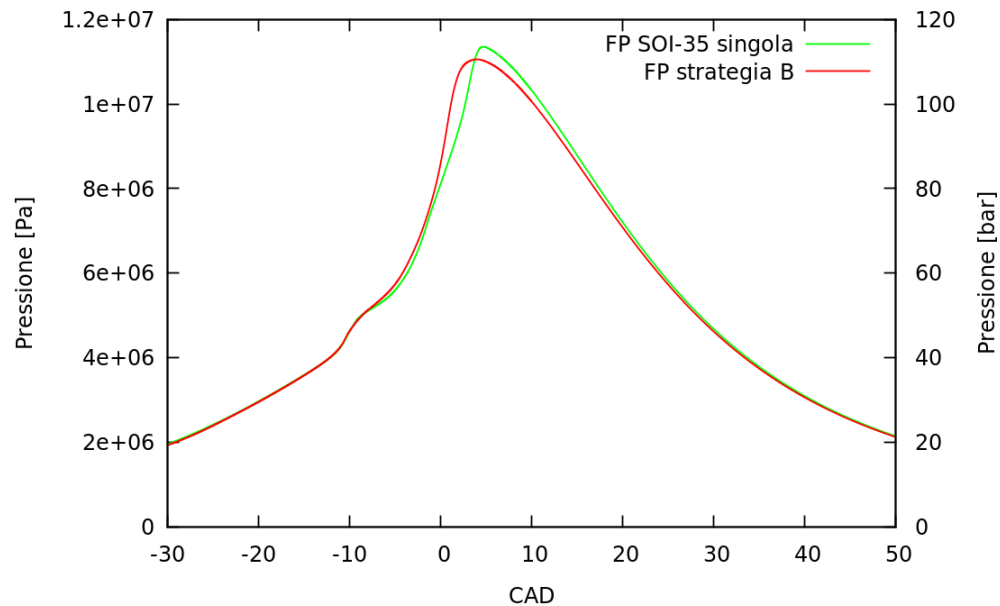


Figura 6.27: Profilo di pressione ottenuto utilizzando l'iniezione tripla (FP)

Nella seguente tabella si effettua un confronto diretto fra i risultati ottenuti nei due casi presi in considerazione:

Confronto fra iniezione singola e iniezione tripla								
Motore	$L_{gross}$ [J]	$Q_{comb}$ [J]	$Q_{tot}$ [J]	$\eta_{comb}$ [%]	$\xi_{comb}$ [%]	$\eta_{gross}$ [%]	GMEP [bar]	$\left(\frac{dp}{dt}\right)_{MAX}$ $\left[\frac{bar}{ms}\right]$
SOI-35	702.1	1608.97	1627.9	43.64	98.84	43.13	9.37	201.6
Iniezione tripla	687.7	1584.3	1627.9	43.41	97.32	42.25	9.18	235.1

Dal confronto si evince che, fra le due strategie di iniezione considerate, non è quella più complessa ad ottenere il migliore. Si era pensato che, come era successo per la simulazione FP SOI-38 descritta al paragrafo 6.3.1, una miscela più uniforme avrebbe ritardato l'accensione ed ottenuto una combustione più efficiente. Questo risultato sorprendente ha spinto ad approfondire su quale fosse la spiegazione della minor efficienza del processo.

Visualizzando in *Paraview* la distribuzione di  $Z$  ottenuta istante per istante nelle due diverse simulazioni, è stata fatta una scoperta interessante. Nonostante gli sforzi sostenuti nella direzione di ottenere un miglior processo di miscelamento, con l'utilizzo di una sofisticata iniezione tripla, non si è riusciti ad ottenere una carica più uniforme di quella ottenuta con iniezione singola. Si guardi il confronto effettuato in figura 6.29 per poter apprezzare la differenza. Nella prima coppia di figure in alto, in cui si confronta la distribuzione di  $Z$  all'istante -10 CAD, si può notare che l'utilizzo di una iniezione tripla visualizza la presenza di una zona molto ricca, non presente invece in caso di iniezione singola.

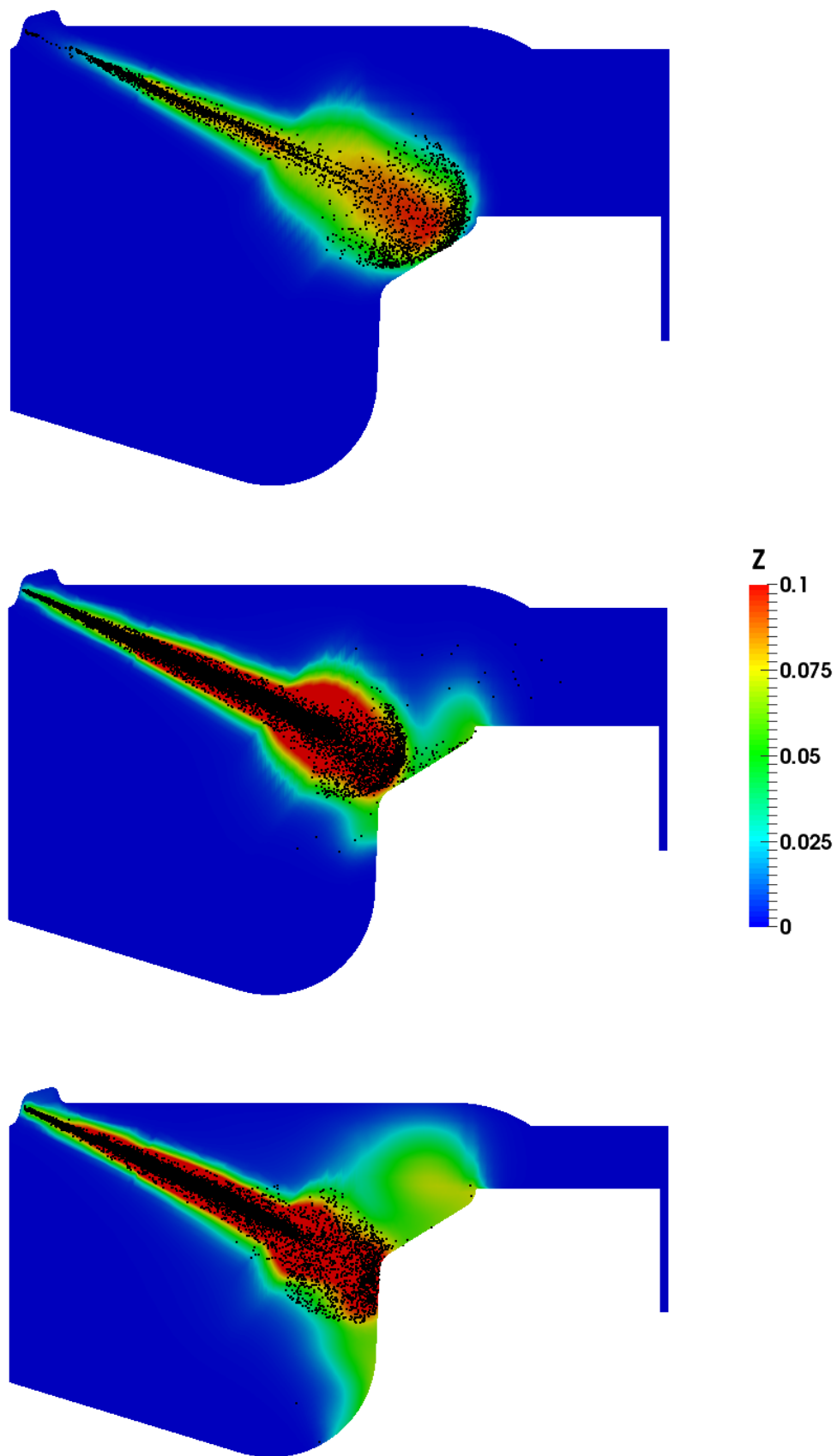


Figura 6.28: Punti di impatto relativi alle singole iniezioni (iniezione tripla)

Il risultato è singolare, ma può essere spiegato studiando la struttura del campo di moto ottenuto nei due casi, visibile nella sottostante coppia di figure. Si può notare come nel caso di iniezione singola si vengano a creare dei moti vorticosi più intensi rispetto al caso di iniezione tripla, sia nella parte fonda della tazza che in prossimità della zona di squish. Questi moti vorticosi permettono una migliore distribuzione del combustibile nella camera di combustione.

Si conclude che l'effetto di trascinamento esercitato dallo spray sulla carica è di fondamentale importanza per ottenere una combustione PCCI efficiente. Nel caso di iniezione singola, lo spray insiste sul bordo superiore della tazza venendo deviato nelle direzioni opposte. Questa azione, prolungata nel tempo, porta alla formazione ed all'intensificazione dei moti vorticosi visibili in figura 6.29. In caso di iniezione multipla, questa azione è intermittente e di ridotta durata ad ogni atto di iniezione. Questa analisi ci ha permesso di sottolineare ancora una volta l'importanza della turbolenza e dell'interazione dello spray con la geometria della camera, nella preparazione della carica in un motore PCCI.

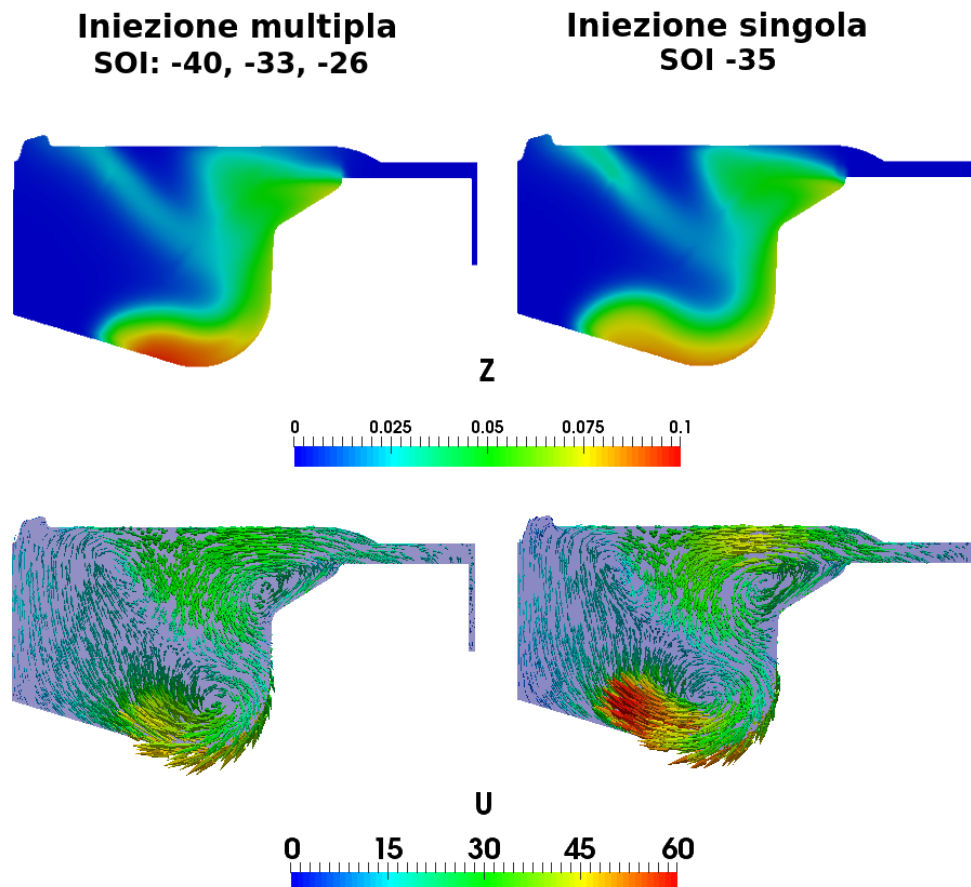


Figura 6.29: Campo di moto nel caso di iniezione tripla e singola (FP)

### 6.3.5 Conclusioni tratte dall'analisi svolta

Nei paragrafi 6.3.1, 6.3.2, 6.3.3 e 6.3.4 si è testata la risposta del motore al variare delle condizioni operative. I risultati ottenuti si sono dimostrati talvolta di difficile interpretazione.

Sulla base di quanto ottenuto si può concludere che la regolazione di un motore PCCI non è un'operazione banale. Provando a variare il SOI, parametro sul quale si può avere un controllo efficace, la risposta del motore è buona solo all'interno di un intervallo ristretto (SOI:  $-38 \div -32$ ). Al di fuori di questo intervallo si riscontrano diverse problematiche che riducono l'efficienza globale del motore, sia in termini di lavoro generato sia di produzione di inquinanti. Nella maggior parte dei casi, si dimostra che un corretto *targeting* dello spray permetterebbe di ottenere un processo più efficiente. Al giorno d'oggi non si ha la possibilità di variare l'inclinazione dello spray, in modo da ottenere un buon processo di miscelamento della carica ad ogni valore di SOI utilizzato. Sono stati mossi alcuni passi nella direzione dello sviluppo delle AIS (*Adaptive Injection Strategies*), che prevedono l'utilizzo di iniettori a geometria variabile, strategie che permetterebbero di ottimizzare l'iniezione su un campo più ampio di valori del SOI. Tuttavia non si può avere la certezza che questi iniettori vengano commercializzati in futuro. Facendo questa premessa si è cercato di migliorare il funzionamento del motore FP, in condizioni di SOI non ottimizzato, adottando strategie diverse. Sia la riduzione del grado di EGR, sia l'aumento della temperatura del combustibile, hanno mostrato un aumento (seppur limitato) della completezza della combustione.

La produzione di inquinanti si è però dimostrata in molti casi elevata. Serve approfondire in tale direzione per verificare la reale fattibilità di queste soluzioni.

In ultima analisi si è provato a studiare il comportamento del motore all'utilizzo di iniezioni multiple. Nonostante la logica suggerisse che si sarebbe potuto ottenere un buon risultato generando iniezioni multiple di durata ridotta, la messa in pratica di tale strategia ha mostrato al contrario uno scadimento delle prestazioni, dovuto alla creazione di un campo turbolento di minore intensità.

## Conclusioni

Lo studio effettuato ha confermato che la combustione PCCI ha un alto potenziale. La complessità del fenomeno richiede però ricerche approfondite per verificare la reale applicabilità di questo tipo di combustione. In tale direzione, la CFD si dimostra uno strumento molto prezioso. I risultati ottenuti durante la validazione del solutore, relativi ai motori F1C ed F1A, hanno fornito indicazioni importanti sul funzionamento della combustione PCCI, ed hanno permesso di comprendere in maniera più approfondita alcuni dei fenomeni che caratterizzano l'auto-accensione, l'importanza dei moti turbolenti e l'influenza del grado di miscelamento della carica sulla produzione di inquinanti. Si è inoltre concluso che per ottenere dei risultati affidabili dalle simulazioni di combustione PCCI, è necessario utilizzare valori sufficientemente piccoli del valore  $\Delta\varphi$  per la divisione in zone, viceversa l'effetto del regime NTC verrebbe amplificato sovrastimando il ritardo d'accensione. Lo strumento CFD utilizzato ha poi permesso di studiare la risposta del motore F1C-PCCI alla variazione di diversi parametri. Si è riusciti ad ottenere un buon valore di efficienza solo utilizzando valori di SOI molto vicini a quello ottimale. Per ottenere alti valori di efficienza in un più ampio intervallo di SOI, sia in termini di lavoro che di emissioni, si dimostra essere necessario adattare dinamicamente l'angolo di inclinazione dello spray di combustibile, in modo da mantenere in ogni condizione il bordo superiore della tazza del pistone come punto di impatto. Tuttavia questa possibilità non viene data dagli attuali sistemi di iniezione, e non si può avere la certezza che in futuro vengano commercializzati iniettori di tipo adattivo. Nel campo di funzionamento in cui il SOI non è ottimizzato, strategie di controllo come la variazione dell'EGR e la variazione della temperatura permettono di migliorare l'efficienza del processo. Fra le due, la strategia perseguibile con la tecnologia attuale è la variazione dell'EGR. Un'altra condizione che si è dimostrata essere fondamentale al fine di ottenere una buona efficienza, è l'interazione fra il moto di squish ed il moto creato per effetto del trascinamento dello spray. Quando questa interazione è forte, si permette una migliore diffusione del combustibile nella camera di combustione.

Il motore PCCI analizzato ha mostrato possibilità molto limitate per il controllo. Per rendere effettivamente applicabile questa tecnologia, sarebbe necessario condurre un'intensa attività di studio, al fine di trovare una strategia che permetta

un controllo efficace del processo. Se questo non fosse possibile, si concluderebbe che la combustione PCCI è inadatta per applicazioni in condizioni molto variabili, e che dovrebbe essere quindi utilizzata a carico e regimi costanti.

# Lista dei simboli

## Simboli latini

$n$	velocità di rotazione del motore [ <i>rpm</i> ]
$\mathbf{U}$	vettore velocità assoluta
$\mathbf{x}$	vettore posizione in coordinate cartesiane
$\mathbf{g}$	vettore accelerazione gravitazionale
$X_i$	frazione molare della specie <i>i</i> -esima
$Y_i$	frazione massica della specie <i>i</i> -esima
$N_i$	numero di moli della specie <i>i</i> -esima
$h$	entalpia
$p$	pressione
$t$	tempo
$T$	temperatura
$S$	superficie
$\mathbf{S}$	deviatore degli sforzi viscosi
$V$	volume
$W_i$	massa molecolare della specie <i>i</i> -esima

## Simboli greci

$\alpha$	angolo di inclinazione dello spray dalla linea orizzontale
$\mu$	viscosità dinamica
$\rho$	densità
$\phi$	generica grandezza
$\Phi$	rapporto di equivalenza combustibile-aria
$\Phi^*$	rapporto di equivalenza combustibile-ossigeno
$\varphi$	rapporto di equivalenza progressivo
$\tau$	tensore degli sforzi viscosi
$\delta$	tensore di Kronecker
$\eta$	efficienza
$\xi$	completezza della combustione
$\dot{\omega}_i$	velocità di reazione relativa alla specie i-esima
$\Delta$	ampiezza del passo di integrazione

## Apici

$T$	trasposta di una matrice
-----	--------------------------

## Pedici

$s$	stechiometrico
$S$	grandezza relativa alla superficie
$V$	grandezza relativa al volume

## Simboli matematici

$\frac{\partial}{\partial \phi}$	derivata parziale rispetto alla grandezza $\phi$
$\nabla$	operatore divergenza
$dV$	infinitesimo di volume
$d\mathbf{S}$	infinitesimo di superficie moltiplicato per il suo vettore normale
$\cdot$	operatore di moltiplicazione vettoriale





## Lista degli acronimi

### Sigle

<i>AFR</i>	Air Fuel Ratio
<i>AHRR</i>	Apparent Heat Release Rate
<i>BMEP</i>	Brake Mean Effective Pressure
<i>BTC</i>	Bottom Dead Centre
<i>CAD</i>	Crank Angle Degree
<i>CCM</i>	Coordinate Chemistry Mapping
<i>CI</i>	Compression Ignition
<i>DPF</i>	Diesel Particulate Filter
<i>EGR</i>	Exhaust Gas Recirculation
<i>EI</i>	Early Injection
<i>EVC</i>	Exhaust Valve Closure
<i>EVO</i>	Exhaust Valve Opening
<i>GMEP</i>	Gross Indicated Mean Effective Pressure
<i>HCCI</i>	Homogeneous Charge Compression Ignition
<i>HRR</i>	Heat Release Rate
<i>ICE</i>	Internal Combustion Engine
<i>IVC</i>	Intake Valve Closure
<i>IVO</i>	Intake Valve Opening
<i>LI</i>	Late Injection
<i>LTC</i>	Low Temperature Combustion
<i>MCI</i>	Motori a combustione interna
<i>NO<sub>x</sub></i>	Generico ossido di azoto ( <i>NO</i> oppure <i>NO<sub>2</sub></i> )
<i>PCCI</i>	Premixed Charge Compression Ignition
<i>PPCI</i>	Partially Premixed Compression Ignition
<i>PI</i>	Port Injection
<i>SCR</i>	Selective Catalytic Reduction
<i>SI</i>	Spark Ignition
<i>SOC</i>	Start of Combustion
<i>SOI</i>	Start of Injection
<i>TDC</i>	Top Dead Centre
<i>UHC</i>	Unburned Hydrocarbons

# Bibliografia

- [1] G. Ferrari  
Motori a combustione interna  
*Il capitello*  
2000
  
- [2] M. Bollig, H. Pitsch, J.C. Hewson, K. Seshadri  
Reduced n-Heptane Mechanism for Non-Premixed Combustion with  
Emphasis on Pollutant-Relevant Intermediate Species  
*26th Symp (Int) Combust*, pp 729-737 *The Combustion Institute, Pittsburgh,  
PA*  
1996
  
- [3] G. Stiesch  
Modeling Engine Spray and Combustion Processes  
*Springer-Verlag BerlinHeidelberg GmbH*  
2003
  
- [4] Mingfa Yao, Zhaolei Zheng, Haifeng Liu  
Progresso and recent trends in homogeneous charge compression ignition  
(HCCI) engines  
*State Key Laboratory of Engines, Tianjin University, Tianjin 300072, China*  
2008
  
- [5] Willard W. Pulkrabek  
Engineering Fundamentals of the Internal Combustion Engine  
*Prentice Hall*

- [6] Plee SL, Ahmad T, Myers JP  
Flame temperature correlation for the effects of gas recirculation on diesel particulate and NO<sub>x</sub> emissions  
*SAE Paper*  
1981
- [7] John B. Heywood,  
Internal Combustion Engine Fundamentals  
*McGraw- Hill*
- [8] Khanh Cung, Abdul Moiz, Jaclyn Johnson, Seong-Young Lee, Chol-Bum Kweon, Alessandro Montanaro  
Spray-combustion interaction mechanism of multiple-injection under diesel engine conditions  
*Michigan Tech University, Houghton, MI, USA*  
*US ARL, VTD, Propulsion Division (RDRL-VTP), USA*  
*Istituto Motori – CNR, Naples, Italy*  
2014
- [9] Andrea Fiorello  
Le auto più vendute in Europa e in Italia  
*Link: [www.ilpost.it/2014/10/22/le-auto-piu-vendute-europa-italia](http://www.ilpost.it/2014/10/22/le-auto-piu-vendute-europa-italia)*  
22/11/2014
- [10] H. Zhao  
Advanced Direct Injection Combustion Engine Technologies and Development  
2009
- [11] Mark P.B. Musculus, Paul C. Miles, Lyke M. Pickett  
Conceptual models for partially premixed low-temperature diesel combustion  
*Sandia National Laboratories, USA*  
2011
- [12] Hyung-min Kim, Yung-jin Kim, Ki-hyung Lee  
A Study of the Characteristics of Mixture Formation and Combustion in a PCCI Engine Using an Early Multiple Injection Strategy  
*Energy & Fuels*, 1542–1548  
2008

- 
- [13] Sangsuk Lee, Rolf D. Reitz  
Spray Targeting to Minimize Soot and CO Formation in Premixed Charge  
Compression Ignition (PCCI) Combustion with a HSDI Diesel Engine  
*SAE PAPER*, 2006-01-0918  
2006
- [14] Li Cao, Amit Bhave, Haiyun Su, Sebastian Mosbach, Markus Kraft  
Influence of Injection Timing and Piston Bowl Geometry on PCCI  
Combustion and Emissions  
*SAE International Journal of Engines*, 2009-01-1102  
2009
- [15] An Introduction to Computational Fluid Dynamics  
*Prentice Hall*  
2007
- [16] J. H. Ferziger, M. Peric  
Computational Methods for Fluid Dynamics  
*Springer*  
2002
- [17] H. Jasak  
Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with  
Applications to Fluid Flows  
*PhD Thesis, Imperial College, London*  
1996
- [18] F. Contino, H. Jeanmart, T. Lucchini, G. D'Errico  
Coupling of in situ adaptive tabulation and dynamic adaptive chemistry: An  
effective method for solving combustion in engine simulations  
*Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 33(2):pp. 3057–3064  
2011
- [19] P. K. Senecal, E. Pomraning, K. J. Richards  
Multidimensional Modelling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length  
and Flame Lift-off Length using CFD and Parallel Detailed Chemistry  
*SAE Paper*, 2003-01-1043  
2003

- [20] X. Yang, A. Solomon, T. Kuo  
Ignition and Combustion Simulations of Spray-Guided SIDI Engine using Arrhenius Combustion with Spark-Energy Deposition Model  
*SAE Paper*, 2012-01-0147  
2012
- [21] T. Lucchini, G. D'Errico, D. Ettorre, G. Ferrari  
Numerical investigation of non-reacting and reacting Diesel sprays in constant-volume vessels  
*SAE paper*, 2009-01-1971  
2009
- [22] S.C. Kong, Y. Sun, R. D. Reitz  
Modeling diesel spray flame liftoff, sooting tendency, and  $NO_x$  emissions using detailed chemistry with phenomenological soot model  
*Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 129:pp. 245–251  
2007
- [23] S. Som, S.K. Aggarwal  
Effects of primary breakup modeling on spray and combustion characteristics of compression ignition engines  
*Combustion and Flame*, 157(6):1179 – 1193  
2010
- [24] S.C. Kong, R.D. Reitz  
Application of detailed chemistry and CFD for predicting direct injection HCCI engine combustion and emissions.  
*Proc. Combust. Inst.*, 29, 663  
2002
- [25] Tianfeng Lu, Law, Chung K  
Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations  
*Progress in Energy and Combustion Science* , 35(2)  
2009

- 
- [26] Aceves, S. M. Flowers, D. L., Westbrook, C., Smith, J. et al.  
A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions  
*SAE Technical Paper*, 2000-01-0327  
2000
- [27] D. Flowers, S. Aceves, R. Smith, J. Torres, J. Girard, R. Dibble  
HCCI in a CFR engine: Experiments and Detailed Kinetic Modeling.  
*SAE Technical Paper*, 2000-01-0328  
2000
- [28] A. Babajimopoulos, D. N. Assanis, D. L. Flowers, S. M. Aceves, R. P. Hessel  
A fully coupled computational fluid dynamics and multi-zone model with  
detailed chemical kinetics for the simulation of premixed charge compression  
ignition engines  
*International Journal of Engine Research*, vol. 6, 5: pp. 497-512  
October 1, 2005
- [29] R. P. Hessel, D. Foster, S. M. Aceves, M. Davisson et. al.  
Modeling Iso-octane HCCI Using CFD with Multi-Zone Detailed Chemistry;  
Comparison to Detailed Speciation Data Over a Range of Lean Equivalence  
Ratios  
*SAE Technical Paper* 2008-01-0047  
2008
- [30] Mandhapati Raju, Mingjie Wang, Meizhong Dai, William Piggott, Daniel  
Flowers  
Acceleration of Detailed Chemical Kinetics Using Multi-zone Modeling for  
CFD in Internal Combustion Engine Simulations  
*SAE international*, 2012-01-0135  
2012
- [31] F.Contino, T. Lucchini, G. D'Errico, C. Duynslaegher, V. Dias, H. Jeanmart  
Simulations of Advanced Combustion Modes Using Detailed Chemistry  
Combined with Tabulation and Mechanism Reduction Techniques  
*SAE INTERNATIONAL JOURNAL OF ENGINES*, DOI: 10.4271/2012-01-  
0145  
2012

- [32] P. Pepiot-Desjardins, H. Pitsch  
An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms.  
*Combustion and Flame*, 154(1-2):67–81  
2008
- [33] B.M. Kumfer, S.A. Skeen, R.L. Axelbaum  
Soot inception limits in laminar diffusion flames with application to oxy–fuel combustion  
*Combustion and Flame*, 154 (2008) 546–556  
2008
- [34] Carlo Beatrice, Chiara Guido  
Benefits and drawbacks of compression ratio reduction in PCCI combustion application in an advanced LD diesel engine  
*14th Diesel Engine - Efficiency and Emissions Research (DEER) Conference*
- [35] Yong Sun, Eric D. Weninger, Rolf D. Reitz  
Adaptive Injection Strategies (AIS) for Ultra-Low Emissions Diesel Engines  
*DEER 2007 Conference*, Detroit, MI  
08/16/2007