

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI ROMA
“LA SAPIENZA”
DIPARTIMENTO DI INGEGNERIA ASTRONAUTICA,
ELETTRICA ED ENERGETICA



TESI DI DOTTORATO IN ENERGETICA

*Simulazioni CFD per la riduzione delle emissioni in motori
diesel a carica omogenea*

Candidato

Ing. Roberto Meloni

Docente guida

Prof. Ing. Vincenzo Naso

A.A. 2012/2013

Alla mia Famiglia...
e a Caterina.

SOMMARIO

SOMMARIO	5
INDICE DELLE FIGURE.....	9
INDICE DELLE TABELLE.....	13
1 Introduzione	15
Bibliografia.....	21
2 La combustione Diesel e HCCI.....	23
2.1 <i>La combustione diesel tradizionale</i>	23
2.1.1 <i>Meccanismi di formazione degli NO_x.....</i>	26
2.1.2 <i>Meccanismi di formazione del particolato.....</i>	28
2.2 <i>La combustione HCCI</i>	31
2.2.1 <i>Introduzione</i>	31
2.2.2 <i>Cenni storici sulla combustione HCCI.....</i>	34
2.2.3 <i>Combustione HCCI con combustibili per motori ad A.C.....</i>	35
2.2.4 <i>Combustione HCCI con combustibili per motori ad A.S.....</i>	36
2.2.5 <i>Parametri fondamentali per il controllo della combustione HCCI.....</i>	41
Bibliografia	53
3 Il fenomeno dell'iniezione	55
3.1 <i>Iniezione: fenomenologia generale.....</i>	55
3.1.1 <i>Il Break-up.....</i>	56
3.1.2 <i>Il Break-up nel caso di flussi turbolenti</i>	57
3.2 <i>Modello di break-up classico.....</i>	57
3.2.1 <i>Il break-up di un getto liquido</i>	58
3.3 <i>Atomizzazione prompt.....</i>	59
3.4 <i>La distribuzione del diametro delle gocce.....</i>	60
3.4.1 <i>Funzioni matematiche per la distribuzione</i>	61
3.5 <i>Il diametro medio di Sauter</i>	62
3.5.1 <i>Le espressioni del SMD per i vari tipi di iniettori.....</i>	63
3.5.2 <i>Iniettore plain orifice.....</i>	65
3.5.3 <i>Commenti sulle varie espressioni per il SMD.....</i>	65

3.6	<i>Cavitazione all'interno dell'iniettore</i>	66
3.7	<i>Il coefficiente di efflusso</i>	67
3.8	<i>Penetrazione del getto</i>	69
3.9	<i>Angolo di apertura del cono dello spray</i>	69
3.10	<i>Classificazione dei sistemi di iniezione</i>	71
3.10.1	<i>Il sistema common rail</i>	72
Bibliografia		77
4	Teoria di base della CFD	79
4.1	<i>Introduzione</i>	79
4.2	<i>Equazioni di trasporto</i>	79
4.2.1	<i>Equazione di conservazione della massa</i>	80
4.2.2	<i>Equazione di conservazione della quantità di moto</i>	80
4.2.3	<i>Equazione di conservazione delle specie chimiche</i>	81
4.2.4	<i>Equazione di conservazione dell'energia</i>	81
4.3	<i>Le leggi costitutive</i>	82
4.4	<i>Le equazioni di Navier-Stokes</i>	84
4.5	<i>Le caratteristiche dei flussi turbolenti</i>	86
4.6	<i>I modelli di turbolenza e i codici di calcolo CFD</i>	88
4.6.1	<i>Metodologie di discretizzazione</i>	89
4.7	<i>Risoluzione del sistema di equazioni algebriche</i>	92
4.8	<i>I diversi approcci per lo studio della turbolenza</i>	92
4.8.1	<i>Approccio RANS</i>	95
4.8.2	<i>Approccio LES</i>	99
4.9	<i>La combustione turbolenta</i>	102
4.10	<i>Combustione non premiscelata</i>	103
4.11	<i>Turbolenza e combustione non premiscelata</i>	105
4.12	<i>La generazione delle flamelet</i>	106
Bibliografia		109
5	Simulazioni spray	111

5.1	<i>Introduzione</i>	111
5.2	<i>La mesh adottata nelle simulazioni dell'iniettore e dello spray</i>	112
5.2.1	<i>La mesh per il flusso all'interno dell'iniettore</i>	112
5.2.2	<i>La mesh per lo spray</i>	115
5.3	<i>I combustibili simulati</i>	117
5.4	<i>La trattazione matematica per il flusso cavitante</i>	118
5.5	<i>Il modello wave per il break-up dello spray</i>	119
5.6	<i>I risultati delle simulazioni dell'iniettore</i>	121
5.7	<i>I risultati delle simulazioni dello spray</i>	125
5.7.1	<i>La penetrazione assiale</i>	133
5.7.2	<i>L'angolo di apertura dello spray</i>	135
5.7.3	<i>Il diametro medio di Sauter</i>	138
	Bibliografia	141
6	Simulazioni HCCI	143
6.1	<i>Introduzione</i>	143
6.2	<i>Modello computazionale</i>	146
6.2.1	<i>Il modello della combustione</i>	146
6.2.2	<i>Modelli per calcolo delle emissioni inquinanti</i>	148
6.3	<i>Specifiche del motore</i>	151
6.4	<i>Specifiche della griglia di calcolo utilizzata</i>	153
6.5	<i>Risultati</i>	155
6.5.1	<i>Validazione</i>	155
6.5.2	<i>Iniezioni multiple</i>	163
	Bibliografia	172
7	Sfruttamento dell'EGR	175
7.1	<i>Calcolo della composizione di ossidante aspirato</i>	175
7.2	<i>Effetto dell'EGR sul ritardo all'accensione</i>	177
7.3	<i>Emissioni NO_x e incombusti</i>	179
7.4	<i>Prestazioni</i>	183

Bibliografia	185
Conclusioni.....	187
Appendice A.....	191
Appendice B.....	193
Ringraziamenti	195

INDICE DELLE FIGURE

Figura 1.1 Domanda di combustibile mondiale nel settore dei trasporti, in milioni di barili equivalenti di petrolio per giorno [2].	15
Figura 1.2 Evoluzione storica dei limiti alle emissioni secondo i vari Standard europei [4].	16
Figura 2.1 Tipico andamento della legge di rilascio del calore per una combustione diesel tradizionale.	23
Figura 2.2 Sintesi della formazione degli inquinanti in un motore diesel ad iniezione diretta durante le fasi della combustione premiscelata e diffusiva.	25
Figura 2.3 Velocità di formazione degli ossidi di azoto con la temperatura (sinistra) e con.....	26
Figura 2.4 Correlazione tra concentrazione di soot ed NO_x e sviluppo della fiamma..	29
Figura 2.5 Radiazione emessa da particelle di soot incandescenti in un motore diesel	30
Figura 2.6 Velocità di ossidazione del soot in funzione della temperatura.	30
Figura 2.7 Innesco della combustione nei motori tradizionali e in quello HCCI.	32
Figura 2.8 Regioni di formazione di NO_x e particolato al variare del rapporto di	32
Figura 2.9 Confronto tra processi di combustione: sopra HCCI, sotto motore	35
Figura 2.10 Entrata della carica nel cilindro nel caso di iniezione indiretta.....	37
Figura 2.11 Moto di swirl [17].	46
Figura 2.12 Condotto di aspirazione orientato [17].	46
Figura 2.13 Condotto di aspirazione di forma elicoidale [17].	47
Figura 2.14 Moto di Tumble [17].	47
Figura 2.15 Moto di squish [17].	48
Figura 2.16 Bowl del pistone di un motore diesel [17].	48
Figura 2.17 Confronto tra angolo di iniezione tradizionale (a) e con tecnologia NADI (b) [19]	51
Figura 3.1 Break-up di un getto laminare.	58
Figura 3.2 Esempio di distribuzione del diametro delle particelle.	60
Figura 3.3 Diminuzione del diametro medio all'aumentare della pressione di iniezione.	61
Figura 3.4 Esempio di distribuzione Rosin-Rammler.	62
Figura 3.5 Relazione tra lo spessore iniziale e l'angolo del cono.	64
Figura 3.6 Cavitazione all'interno dell'iniettore [11].	67
Figura 3.7 Relazione tra CD_{MAX} e il rapporto lunghezza/diametro dell'iniettore.	68
Figura 3.8 Penetrazione massima e angolo del cono di uno spray [11].	70
Figura 3.9 Angolo di spray in funzione della pressione di iniezione (curve parametrizzate tramite il rapporto r/d) [14].	71
Figura 3.10 Schema di un sistema di iniezione con Common Rail [11].	72
Figura 3.11 Schema di un elettroiniettore [11].	74
Figura 3.12 Confronto fra iniettore VCO (a) e Mini-Sac (b) [11].	74
Figura 3.13 Esempio di segnale Unijet vs segnale multijet con strategia a 5 iniezioni [11].	75
Figura 4.1 Esempio di moto turbolento prodotto dal un aereo e macroscala dei vortici.	87
Figura 4.2 Differenze nell'approccio risolutivo per i metodi DNS, LES e RANS.	94
Figura 4.3 Schematizzazione del modello delle flamelet.	105

Figura 4.4 Modello di flamelet a contro diffusione.	106
Figura 4.5 Andamento delle principali grandezze in funzione della distanza “lato aria”.	107
Figura 5.1 Parte terminale di un iniettore e forma dell’iniettore mini-sac.	113
Figura 5.2 Posizione A e B dell’iniettore.	114
Figura 5.3 Il dominio computazionale e le sue condizioni al contorno.	114
Figura 5.4 Mesh adottata per le simulazione dello spray ed angoli formati dalla griglia.	116
Figura 5.5 Infittimento della mesh sulla base del gradiente di concentrazione.	117
Figura 5.6 La formazione dello spray nel modello WAVE.	120
Figura 5.7 Frazione di vapore per $p_{inj} = 200$ MPa e $\rho_{amb} = 30$ kg/m ³	122
Figura 5.8 Densità alla sezione di uscita e differenza percentuale con quella nominale.	123
Figura 5.9 Velocità del flusso nel piano mediano ed in corrispondenza della sezione di uscita.	123
Figura 5.10 Effetto della temperature sulla velocità a) e sulla portata in massa b). ...	125
Figura 5.11 Regimi di flusso interno all’iniettore: singola fase (a), cavitante (b) e “flipped” (c).	126
Figura 5.12 Flow chart per la determinazione del numero di fasi all’interno dell’iniettore.	128
Figura 5.13 Accoppiamento dei due diversi tipi di simulazione.	130
Figura 5.14 Accoppiamento della portata in massa con il profilo di iniezione.	130
Figura 5.15 Portata in massa, TKE, velocità di iniezione e coefficiente di efflusso per densità ambiente a 15 kg/m ³ e 30 kg/m ³	132
Figura 5.16 Confronto tra i risultati sperimentali ed i dati numerici relativi alla penetrazione assiale per le diverse pressioni di iniezione: a) $P_{inj}=100$ MPa; b) $P_{inj}=200$ MPa.	134
Figura 5.17 Valore dell’angolo di apertura del cono per il gasolio nei casi simulati.	136
Figura 5.18 Valore dell’angolo di apertura del cono per il biodiesel nei casi simulati.	136
Figura 5.19 Confronto tra la forma dello spray risultante dalle simulazione e dalle misure sperimentali a diverse condizioni operative (0.4 ms after SOI): a) $p_{inj} =$ 100 MPa, $\rho_{amb} = 15$ kg/m ³ ; b) $p_{inj} = 200$ MPa, $\rho_{amb} = 30$ kg/m ³	137
Figura 5.20 Interazione liquido-aria nella zona di massima penetrazione assiale ($p_{inj} = 100$ MPa, $\rho_{amb} = 15$ kg/m ³ , istante: 0.4 ms).	138
Figura 5.21 Evoluzione temporale del diametro medio di Sauter.	139
Figura 6.1 Calcolo del modello Flamelet.	148
Figura 6.2 Schema di interazione tra il modello di combustione e la UDF per il calcolo NO _x	149
Figura 6.3 Sistema di acquisizione dei dati sperimentali.	151
Figura 6.4 Sezione trasversale della camera di combustione.	152
Figura 6.5 Mesh della camera di combustione al PMS.	153
Figura 6.6 Tecnica della stratificazione.	154
Figura 6.7 Moto dell’aria per effetto dello swirl.	154
Figura 6.8 Effetto dell’injection timing su IMEP e ISFC per la singola iniezione:	156
Figura 6.9 Effetto delle strategie di combustione sulla concentrazione finale di CO.	157
Figura 6.10 Effetto dell’anticipo dell’iniezione sulle emissioni di NO, con vista dell’interno	158

Figura 6.11 Correlazione tra la concentrazione di NO e la temperatura nel cilindro a 740 CA.....	159
Figura 6.12 Mappe di rapporto di miscela, temperatura e frazione massica di NO al variare dell'anticipo iniezione.	160
Figura 6.13 Mappa della frazione massica di combustibile sul piano mediano e mappa 3D della vorticità.	161
Figura 6.14 Punti operativi della combustione HCCI.	161
Figura 6.15 Confronto tra HRR e temperatura per i casi di iniezione a -50 e -10 deg BTDC.....	162
Figura 6.16 Ritardo all'accensione all'aumentare dell'anticipo iniezione e.....	163
Figura 6.17 Quadro generale delle differenti strategie di iniezione multipla investigate.	164
Figura 6.18 Diagramma HRR: confronto tra diverse strategie di iniezione: convenzionale, HCCI con singola iniezione e HCCI con doppia iniezione.	165
Figura 6.19 Iso temperatura a 1700 K colorata in base alla mole fraction di NO: confronto tra i tre regimi di combustione.	166
Figura 6.20 Influenza della fasatura della seconda iniezione e della differente quantità di massa iniettata sulle emissioni di NO.	167
Figura 6.21 Mappe di temperatura e frazione di NO per tre strategie diverse di iniezione multipla.	168
Figura 6.22 Concentrazione di CO allo scarico: effetto delle iniezioni multiple in confronto con diesel convenzionale e HCCI singola iniezione a -50 BTDC.	169
Figura 6.23 Effetto delle strategie con iniezione multipla sulla IMEP e ISFC.	170
Figura 7.1 Andamenti dell'HRR: strategia di iniezione -50 BTDC/+10 ATDC, 70/30 e 80/20 prima e seconda percentuale di massa iniettata, 0%/20% EGR.	178
Figura 7.2 a) Ritardo all'accensione in funzione della massa della prima iniezione e	179
Figura 7.3 Correlazione tra la concentrazione di NO e la temperatura nel cilindro a 740 CA, al variare dell'EGR (fasatura -50 deg BTDC / +5 deg ATDC).	180
Figura 7.4 Superfici iso-temperatura a 1700 K colorate in base alla frazione di NO: confronto tra diversi regimi di combustione.....	181
Figura 7.5 Concentrazione di HC allo scarico: valori di frazione molare e mappe interne al cilindro (CH ₄) al variare dell'EGR per iniezione multipla -50 BTDC/+10 ATDC.....	182
Figura 7.6 Effetto delle strategie con ricircolo dei gas esausti sulla IMEP e ISFC....	184

INDICE DELLE TABELLE

Tabella 5.1 Condizioni al contorno relative alle simulazioni del flusso interno dell'iniettore.	115
Tabella 5.2 Proprietà dei combustibili.	117
Tabella 5.3 Portata in massa per quattro valori differenti di pressione di iniezione. ...	124
Tabella 5.4 Viscosità e densità del biodiesel a differenti temperature.	124
Tabella 5.5 Parametri di input per l'iniettore plain-orifice.	126
Tabella 5.6 Velocità e coefficiente di efflusso nei vari casi simulati.	129
Tabella 5.7 Velocità di efflusso ottenute dalle simulazioni.	131
Tabella 6.8 Costanti per il modello di calcolo delle emissioni di particolato.	150
Tabella 6.9 Specifiche del motore.	152
Tabella 6.10 Caratteristiche del sistema di iniezione.	153
Tabella 7.11 Composizione dei gas di scarico con EGR 0%.	176
Tabella 7.12 Composizione ossidante in ingresso al variare dell'EGR.	177

1 Introduzione

Negli ultimi anni l'industria automobilistica sta vivendo un periodo di notevole fermento dal punto di vista tecnologico: l'incessante tendenza al rialzo del prezzo dei combustibili, le sempre più sentite problematiche riguardanti l'inquinamento delle aree urbane di cui l'autoveicolo è considerato maggiore imputato, la "globalizzazione" e quindi l'instaurazione di una concorrenza a livello mondiale continua e serrata, hanno spinto le case automobilistiche ad un progressivo incremento degli investimenti nel settore "ricerca e sviluppo" al fine di fornire prodotti sempre innovativi in grado di soddisfare le richieste di mercato. Per l'automobilista moderno, bassi consumi, guidabilità e rispetto delle norme antinquinamento sono diventati criteri principali nella scelta di un'autovettura da acquistare.

Le ultime stime condotte sull'andamento del mercato automobilistico europeo, hanno evidenziato che le motorizzazioni diesel, per anni relegate al ruolo di comprimarie rispetto alle unità ad accensione comandata, hanno ormai conquistato una quota rilevante di mercato, come sottolineato anche dalla Figura 1.1 [1]. Questa crescita si deve principalmente all'introduzione, verso la metà degli anni '90, della tecnologia "Common Rail" ed all'estensione della sovralimentazione su tutte le motorizzazioni, creando così una formula vincente basata sull'abbinamento di un'elevata coppia con bassi consumi in tutte le condizioni di funzionamento.

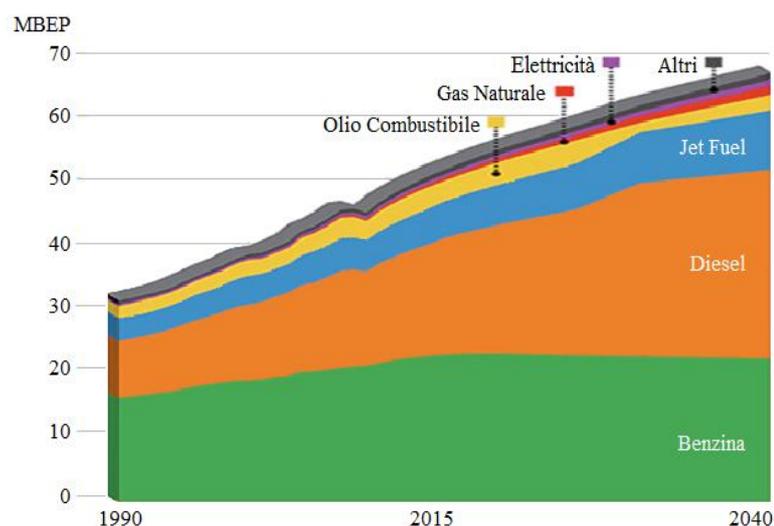


Figura 1.1 Domanda di combustibile mondiale nel settore dei trasporti, in milioni di barili equivalenti di petrolio per giorno [2].

La principale sfida tecnologica del motore diesel è oggi rappresentata dal rispetto dei limiti imposti alle emissioni di sostanze inquinanti. Nei paesi della Comunità Europea, è in vigore dal primo Gennaio 2009 la normativa EURO V, relativa alle limitazioni sulle emissioni di agenti inquinanti allo scarico di veicoli stradali ed in particolare di quelli leggeri destinati al trasporto di persone. Tale obiettivo è stato raggiunto da una parte migliorando il sistema di combustione tradizionale (sistemi iniezione “Common Rail” di terza generazione [3], ottimizzazione della fluidodinamica del motore, ecc.) dall’altra, invece, sviluppando nuove tecnologie di post-trattamento dei gas esausti (catalizzatori ossidanti, trappole per particolato, SCR (Selective Catalytic Reduction) per l’abbattimento degli NO_x , ecc).

La normativa EURO VI, che entrerà in vigore dal settembre 2014, stabilirà, per il trade-off particolato – ossidi di azoto, una drastica riduzione delle concentrazioni di NO_x ammesse (0.5 g/kWh) ed una leggera riduzione dei valori consentiti per la fumosità (0.01 g/kWh), come indicato nella seguente Figura 1.2.

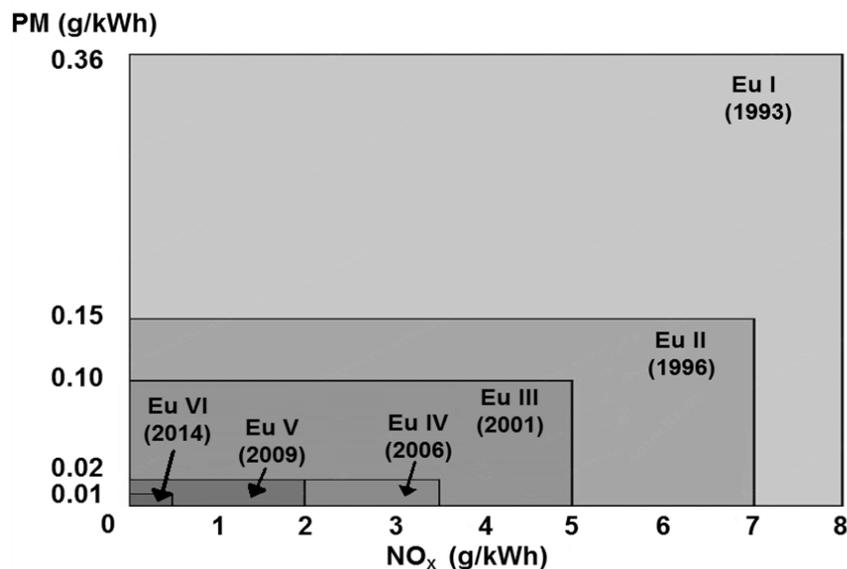


Figura 1.2 Evoluzione storica dei limiti alle emissioni secondo i vari Standard europei [4].

La politica comune delle case automobilistiche per rientrare nella normativa EURO V è stata quella di installare obbligatoriamente lungo la linea di scarico le trappole per il particolato senza così effettuare drastiche modifiche al sistema di combustione operando solo sull’individuazione di nuove calibrazioni dei parametri operativi del motore. Come si può osservare dalla precedente figura, i limiti stimati imposti dalla normativa EURO VI costituiscono una notevole complicazione per il

successo delle motorizzazioni alimentate a gasolio a causa soprattutto della drastica riduzione delle emissioni ammesse per ossidi di azoto.

Gli sforzi del settore sono profusi con l'obiettivo di rispettare le norme antinquinamento, continuando a garantire al motore diesel bassi consumi ed eccellente guidabilità, il tutto con il minor costo addizionale possibile; è in questa direzione che le maggiori case automobilistiche ed i centri di ricerca internazionali sono al lavoro nello sviluppo di nuove soluzioni per il motore del futuro. In particolare, in tale ambito, se da una parte una possibile soluzione è rappresentata dall'accoppiamento dei sistemi di combustione tradizionali con sistemi di post-trattamento dei gas esausti ancora più efficienti, dall'altra, invece, l'interesse va concentrandosi sullo sviluppo di nuovi sistemi di combustione in grado di ridurre, già durante la stessa fase di combustione, le emissioni di ossidi di azoto e particolato solido senza far ricorso, quindi, a complessi sistemi di trattamento dei gas di scarico. È evidente che la prima soluzione al problema, pur essendo già "tecnologicamente pronta", è molto costosa ed inciderebbe sul costo unitario del veicolo. La seconda soluzione, invece, è studiata con molto interesse poiché presenta le potenzialità, nel breve periodo, di rispettare le future norme antinquinamento, e a lungo termine, di raggiungere l'obiettivo di un motore ad emissioni quasi zero (in terminologia anglosassone ULEV – *Ultra Low Emission Vehicle*).

Dal punto di vista concettuale possono essere individuate due principali tipologie di combustioni cosiddette "innovative": la prima, usualmente chiamata in terminologia anglosassone HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition* – Combustione per compressione di una carica omogenea) permette di limitare fortemente la formazione di NO_x e particolato preparando in camera di combustione una miscela quasi completamente omogenea in cui l'auto ignizione avviene in maniera controllata contemporaneamente in tutta la camera di combustione [5]. Lo stesso obiettivo può essere raggiunto seguendo una seconda tipologia che si basa sulla parziale premiscelazione del combustibile con l'aria e sul controllo della temperatura di fiamma per mezzo della diluizione della carica nel cilindro con gas esausti inerti (PCCI – *Premixed Charge Compression Ignition*) [6]. Allo stato attuale le applicazioni di entrambi questi sistemi di combustione sono, però limitate ai regimi di basso e medio carico (fino a 5 bar di pressione media effettiva) con l'inconveniente di presentare un

incremento del consumo specifico di carburante e delle emissioni di monossido di carbonio e idrocarburi incombusti [7]. In questo contesto è indispensabile ottimizzare ogni processo di sviluppo/calibrazione dei motori a combustione interna. La sperimentazione rappresenta tuttora in campo motoristico il mezzo più diffuso per procedere nella progettazione del motore. Tuttavia, gli elevati costi e i tempi di analisi relativamente lunghi legati alla sempre crescente complessità del sistema motore, hanno spinto allo sviluppo di metodi numerici appropriati per un'analisi rapida ed efficace. I risultati ottenibili da un codice di simulazione numerica possono ridurre notevolmente il numero di osservazioni sperimentali necessarie, coniugando le misure effettuate sul motore con i risultati del calcolo.

L'adozione di un codice di simulazione CFD (*Computational Fluid Dynamics*) in fase di progetto preliminare, insieme con la necessaria analisi sperimentale, consente di analizzare diverse configurazioni motoristiche e di limitare pertanto il numero dei prototipi da realizzare come pure il numero di osservazioni da effettuare per individuare una configurazione ottimale. Nelle fasi di affinamento del progetto, lo studio teorico permette inoltre di compiere in tempi rapidi un'analisi di sensibilità sui molteplici parametri funzionali e costruttivi, in modo da suggerire le soluzioni ottimali da verificare sperimentalmente. La continua innovazione nel settore automobilistico deve essere accompagnata dallo sviluppo di nuovi modelli capaci di predire con soddisfacente accuratezza il funzionamento delle nuove tecnologie che progressivamente sono state e saranno introdotte nel sistema motore. In più è necessario affinare i modelli già esistenti al fine di renderli adeguati a simulare correttamente il funzionamento del motore in tutte le condizioni operative.

Nel primo capitolo della presente Tesi, sono descritte in maniera approfondita le principali caratteristiche dei sistemi di combustione a carica premiscelata evidenziandone i vantaggi e gli attuali limiti nonché i possibili sviluppi per una loro applicazione ai motori diesel veloci per la trazione stradale [8-11]. Nel secondo capitolo verrà presentata una panoramica generica sull'analisi CFD, illustrando i metodi e i modelli matematici specifici utilizzati nel lavoro, con i quali sono state affrontate le tematiche connesse direttamente alle combustioni a bassa temperatura nei motori a combustione interna ad uso automobilistico. Nel terzo capitolo vi è la descrizione dei parametri e degli elementi che maggiormente caratterizzano lo spray dal punto di vista

morfologico, ed in particolare è fatta un'illustrazione del modello di iniettore “*plain-orifice*” che è stato utilizzato per l'intero studio. Nel quarto capitolo vengono trattati i risultati delle simulazioni riguardanti lo studio dei fenomeni di iniezione e spray nei motori diesel; questi sono infatti tra gli elementi più critici dato che influenzano significativamente i meccanismi che possono portare alla riduzione delle emissioni inquinanti durante il processo di combustione (pressione di iniezione, penetrazione del getto di combustibile, apertura del cono dello spray). Nello specifico, è stata presa in considerazione l'influenza della cavitazione sulla morfologia dello spray in funzione anche delle sue caratteristiche chimico-fisiche: da questo punto di vista, verrà presentata anche una comparazione tra due tipologie di combustibile, ovvero il diesel tradizionale e biodiesel. È stato studiato il flusso all'interno dell'ugello così da caratterizzare lo sviluppo della cavitazione all'interno dello stesso e mostrare l'influenza delle proprietà fisiche dei combustibili. Successivamente, le caratteristiche del flusso sulla sezione di uscita dell'ugello sono state mediate e introdotte come input nel modello dello spray. La validazione del metodo impiegato è stata eseguita confrontando i dati numerici per lo spray con le prove sperimentali, per i principali parametri quali la *spray tip penetration*, l'angolo del cono e il diametro medio di Sauter (SMD). Nel quinto capitolo sono presentati i risultati relativi alle simulazioni effettuate sull'innovativo regime di combustione HCCI. Si è inizialmente validato il modello del codice CFD su dati sperimentali ottenendo degli ottimi riscontri con quest'ultimi. Dopo aver verificato l'attendibilità del modello, sono stati modificati alcuni parametri sulla base delle attuali tecnologie presenti sui motori diesel utili a ridurre le emissioni inquinanti. In particolare, ci si è concentrati nella modifica di:

- la legge di iniezione: è stata innanzitutto suddivisa la singola iniezione in due iniezioni tenendo costante la massa introdotta all'interno del cilindro. È stato successivamente modificato il tempo di iniezione, variando le tempistiche delle due iniezioni, ed infine si è studiato l'effetto avuto modificando il quantitativo di massa di combustibile ripartito tra queste;
- il ricircolo dei gas combusti EGR: sono state studiate le variazioni di EGR per tutte le tipologie di legge di iniezione; sono stati indagati i casi di ricircolo dei gas combusti con percentuali massime che arrivano al 20%, valori che oggi sono soliti nei motori per autotrazione.

I risultati ottenuti sono in accordo con gli studi delle recenti ricerche. Infatti la combustione HCCI ha dimostrato una sensibile diminuzione delle emissioni di NO_x all'aumentare dell'anticipo dell'iniezione, in confronto alle tipiche fasature di iniezione dei diesel convenzionali. Tuttavia, per iniezioni molto precoci questo vantaggio è accompagnato da un aumento degli incombusti a causa della parziale formazione della miscela fuori dal bowl del pistone. Questo porta alla diminuzione della pressione indicata e quindi all'aumento del consumo specifico. È stato dimostrato che questo fattore negativo può essere limitato attraverso le strategie con iniezione multipla. Inoltre, l'adozione di una iniezione precoce e una ritardata porta anche ad ulteriori benefici: attraverso questo approccio sono stati ottenuti dei risultati di miglioramento anche in merito alle emissioni di NO_x .

È stato verificato che tramite l'EGR si può controllare in modo migliore l'autoaccensione della carica, così da poter aumentare il ritardo all'ignizione e ottimizzare la miscelazione della stessa. Inoltre, sfruttando l'EGR si limitano i picchi di temperatura dato che si mette a disposizione una minor quantità di ossigeno per la combustione, riuscendo così a rendere quasi del tutto trascurabili le emissioni di NO_x per più del 60% dei casi trattati. Infine, l'uso del ricircolo dei gas si è dimostrato utile anche per aumentare la pressione indicata e riportare il motore ad avere le stesse prestazioni dei casi con singola iniezione HCCI.

Bibliografia

- [1] Eichlseder H, Wimmer A. Potential of IC-engines as minimum emission propulsion system. *Atmos Environ* 2003;37(37): 5227–36.
- [2] British Petroleum, BP statistical review, June 2012.
- [3] Dohle U., Kampmann S., Hammer J., Wintrich T., Hinrichsen C., “Advanced Diesel Common Rail Systems for Future Emission Legislation”, Robert Bosch GmbH, Stuttgart, Germany.
- [4] DieselNet. Emissions standards. <http://www.dieselnets.com/standards/> [accessed on 04.06.2013].
- [5] Gray A. W., Ryan T. W., “Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) of Diesel fuel”, Southwest Research Institute, SAE Paper 971676, 1997
- [6] Nakagome K., Shimazaki N., Niimura K., Kobayashi S., “Combustion and Emission Characteristic of Premixed Lean Diesel Combustion Engine”, SAE Paper 970898, 1997.
- [7] Kim MY, Lee CS. Effect of a narrow fuel spray angle and a dual injection configuration on the improvement of exhaust emissions in a HCCI diesel engine. *Fuel* 2007; 86: 2871-2880.
- [8] Hasegawa R., Yanagihara H., “HCCI Combustion in DI Diesel Engine”, SAE Paper 2003-01-0745, 2003.
- [9] Kimura S., Aoki O., Kitahara Y., Aiyoshizawa E., “Ultra-clean combustion technology combining a low-temperature and premixed combustion concept for meeting future emission standards”, SAE Paper no. 2001-01-0200, 2001
- [10] Iwabuchi Y., Kawai K., Shoji T., Kaleda Y., “Trial of new concept diesel combustion system – premixed compression- ignited combustion”, SAE Paper no. 1999-01-0185, 1999
- [11] Yanagihara H., “Ignition timing control at Toyota “Unibus” combustion system”, *Proceedings of IFP International Congress on a New Generation of Engine Combustion Processes for the Future?*, pp. 34-42, 2001.

2 La combustione Diesel e HCCI

2.1 La combustione diesel tradizionale

Prima di descrivere i moderni sistemi di combustione per i motori diesel è necessario descrivere brevemente il processo di combustione “tradizionale” ed i meccanismi di formazione delle specie inquinanti allo scarico. La combustione nei motori diesel è un processo turbolento, fortemente non stazionario e strettamente legato a due importanti fattori: l’immissione del combustibile nel cilindro e l’autoaccensione della sua miscela [1].

Il rapporto globale aria/combustibile (α) in un motore diesel è globalmente povero; a causa della poca volatilità del gasolio e dei brevissimi tempi a disposizione per la miscelazione del combustibile con il comburente, le condizioni locali sono invece fortemente eterogenee, ovvero ci sono zone in cui il rapporto locale aria/combustibile è molto ricco e altre in cui il combustibile è ben miscelato; pertanto la combustione risulta essere più o meno incompleta e le emissioni inquinanti più o meno ingenti. I moderni motori diesel veloci per la trazione stradale leggera sono tutti ad iniezione diretta, nel senso che il combustibile viene iniettato direttamente nel cilindro. Una schematizzazione molto efficace della combustione per questo tipo di motore prevede una divisione in quattro fasi: ritardo all’accensione, combustione premiscelata, combustione diffusiva, ossidazione. Tali fasi sono tutte distinguibili dall’andamento della velocità di rilascio del calore (in terminologia anglosassone HRR – *Heat Release Rate*) un cui esempio è stato riportato in Figura 2.1.

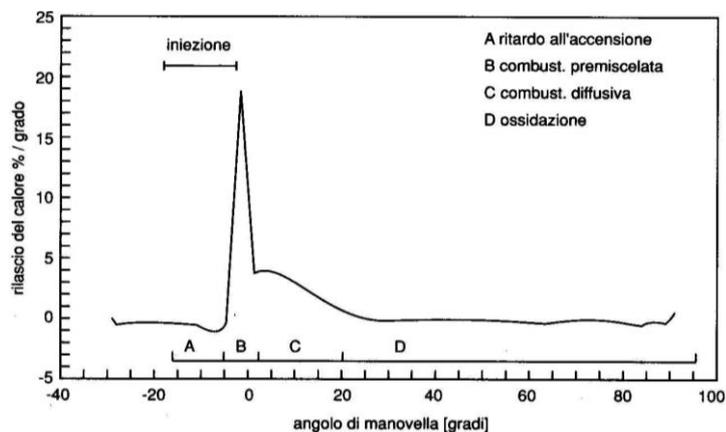


Figura 2.1 Tipico andamento della legge di rilascio del calore per una combustione diesel tradizionale.

Il ritardo all'accensione è il tempo caratteristico che trascorre dall'istante in cui si ha l'iniezione del combustibile fino a quando avviene l'accensione della miscela. Tale parametro dipende dalle caratteristiche del combustibile, dal sistema di combustione e dalle sue condizioni di funzionamento; esso è funzione anche del tempo necessario alla formazione della miscela tra aria e combustibile, e da un tempo chimico, caratteristico del gasolio, una volta instauratesi le condizioni di pressione e temperatura necessarie per l'auto ignizione [2][3].

Durante il ritardo all'accensione, a causa delle elevate temperature raggiunte durante la fase di compressione, il combustibile, prima ancora che si verifichi l'auto accensione, subisce le prime trasformazioni che consistono nella formazione di composti ossigenati, causa della successiva combustione. La miscela così formata si brucia istantaneamente provocando un forte gradiente di pressione. Questa fase, assimilabile ad una combustione omogenea in condizioni povere, è condizionata dalla legge di iniezione e dal ritardo all'accensione. L'inizio di tale fase, che prende il nome di combustione premiscelata, è identificabile sull'andamento dell'HRR riportato in Figura 2.1, nel punto in cui è visibile una brusca variazione della sua pendenza.

In questa fase la combustione è pressoché completa perché avviene in condizioni ricche di ossigeno: la formazione di fuliggine è scarsa così come quella di ossido di carbonio, mentre si ha una massiccia produzione di anidride carbonica, tipico prodotto della combustione completa, e le velocità di formazione degli ossidi di azoto risultano essere massime date le notevoli temperature in gioco [3]. A questa prima fase molto rapida segue in generale una fase più lenta: la fase di combustione diffusiva. Questa riguarda il combustibile non ancora miscelato con l'aria. Quest'ultimo viene a trovarsi in un mezzo in cui la combustione è già sviluppata; le forti temperature in gioco provocano una crackizzazione delle molecole del combustibile abbassando la velocità di reazione; inoltre, condizioni locali di alta temperatura e carenza di ossigeno portano alla formazione di fuliggine e di ossido di carbonio [3].

L'ultima fase è quella di ossidazione. In questa fase il processo di combustione è ormai completo, ma l'alta temperatura e l'ossigeno ancora presenti fanno sì che le specie chimiche formate continuino a reagire ossidandosi. L'ossidazione riguarda soprattutto il particolato solido prodotto durante la fase diffusiva che si presenta come una sorta di prodotto di combustione. Esso si ossida nella zona di fiamma quando

viene a contatto con ossigeno non bruciato. La fuliggine emessa allo scarico è pertanto il risultato del bilancio tra i processi di formazione e di ossidazione che sono concomitanti durante tutta la combustione. Bisogna osservare che l'efficienza del processo di ossidazione del particolato è molto elevata (90 – 95%) per cui, la reale quantità emessa allo scarico è solo una piccola percentuale di quella formata durante la combustione diffusiva [3].

Nei moderni motori, l'iniezione diretta viene prevalentemente realizzata utilizzando il sistema “*Common Rail*” [1]. Questo permette di iniettare il combustibile all'interno del cilindro ad alta pressione in modo da migliorarne l'atomizzazione, l'evaporazione e la miscelazione con il comburente in essa contenuto. Il combustibile iniettato in camera di combustione, appena prima che avvenga la combustione, si trova sotto forma di goccioline di diverse dimensioni ciascuna circondata da un film di aria e vapore di gasolio. La grandezza delle gocce dipende dal processo di atomizzazione dello spray, il quale è a sua volta influenzato da alcuni parametri termodinamici (pressione di iniezione, pressione in camera, ecc.), ed alcuni geometrici come la forma dei fori del pulverizzatore. La miscelazione del combustibile avviene principalmente nelle zone esterne dello spray. La velocità di miscelazione dipende dalla turbolenza nella camera di combustione e dalla velocità relativa tra lo spray e l'aria [1-4]. A partire da queste osservazioni è intuitivo capire come le goccioline più grandi diano luogo a miscele locali ricche e quindi in carenza di ossigeno: questa è una prima spiegazione alle cause della formazione degli inquinanti (soprattutto particolato ed incombusti).

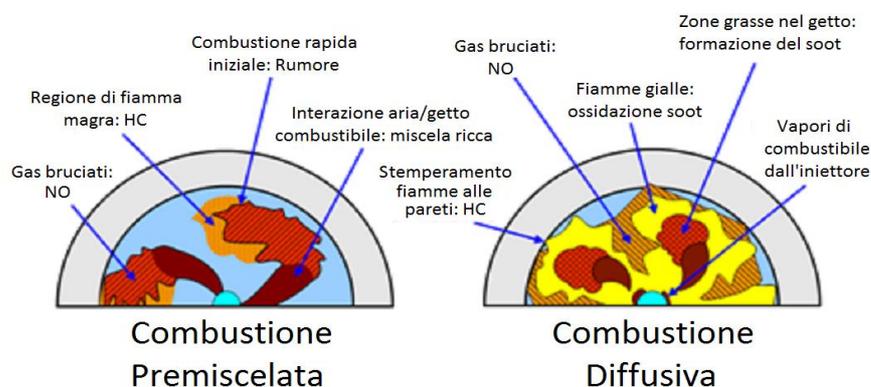


Figura 2.2 Sintesi della formazione degli inquinanti in un motore diesel ad iniezione diretta durante le fasi della combustione premiscelata e diffusiva.

La Figura 2.2 illustra qualitativamente come le varie parti del getto di combustibile e della fiamma influiscono sulla formazione degli ossidi di azoto, idrocarburi incombusti e fuliggine durante le fasi di combustione premiscelata e diffusiva in un motore diesel ad iniezione diretta. A questo punto è utile entrare ancora più in dettaglio sui meccanismi di formazione degli ossidi di azoto e del particolato nei motori diesel.

2.1.1 Meccanismi di formazione degli NO_x

In generale, gli ossidi di azoto (NO , N_2O , NO_2 ed altri) sono generati dai processi di combustione, qualunque sia il combustibile utilizzato, per reazione diretta ad alta temperatura ($>1200\text{ }^\circ\text{C}$) tra l'azoto e l'ossigeno dell'aria, come raffigurato in Figura 2.3.

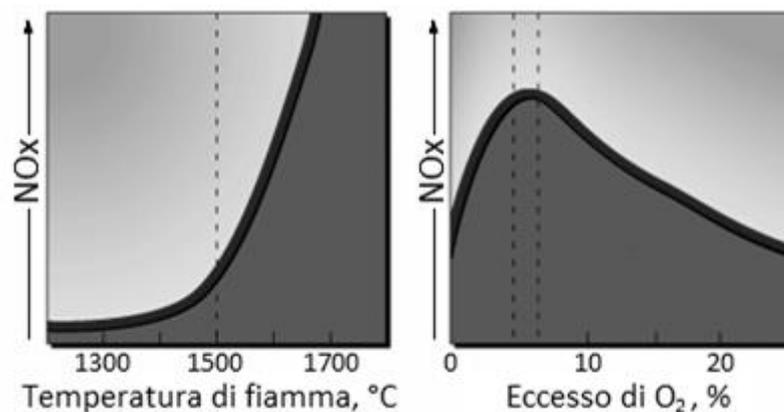


Figura 2.3 Velocità di formazione degli ossidi di azoto con la temperatura (sinistra) e con l'eccesso di ossigeno (destra).

I processi di combustione emettono quale componente principale monossido di azoto (NO) che, nelle emissioni di un motore a combustione interna, rappresenta circa il 98% delle emissioni totali di ossidi di azoto. Successivamente, il monossido di azoto in presenza di ossigeno si trasforma in biossido di azoto. La formazione diretta di biossido di azoto dai processi di combustione è strettamente correlata agli elevati valori di pressione e temperatura che si realizzano all'interno delle camere di combustione dei motori. Le reazioni che governano la formazione e la riduzione degli NO sono:



A partire da queste reazioni si può esprimere la velocità di formazione:

$$d \frac{[NO]}{dt} = K[N_2][O] + k'[NO]^2[O][O_2]^{-1} \quad (4)$$

dove $[NO][N_2][O][O_2]$ sono le concentrazioni molari dei prodotti e K e k' sono espressioni del tipo Arrhenius:

$$K = k \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (5)$$

con E_a energia di attivazione, T temperatura assoluta, R costante dei gas. La velocità di formazione è quindi funzione esponenziale della temperatura assoluta.

I fumi di scarico degli autoveicoli contribuiscono enormemente all'inquinamento da NO; la quantità di emissioni dipende dalle caratteristiche del motore e dalla modalità del suo utilizzo (velocità, accelerazione, ecc.). La miscela degli ossidi di azoto, una volta immessa nell'ambiente, vi permane fino a 5 giorni, prima di essere rimossa con formazione di acido nitrico (HNO_3) e quindi di nitrati. Pertanto, in particolari condizioni meteorologiche e in presenza di concentrazioni elevate, tale sostanza può diffondersi nell'atmosfera ed interessare territori situati anche a grande distanza dalla sorgente inquinante.

Per quanto riguarda gli effetti sulla salute dell'uomo, sia il monossido di azoto che il biossido di azoto risultano potenzialmente pericolosi per la salute. In particolare il monossido di azoto, analogamente al monossido di carbonio, agisce sull'emoglobina, fissandosi ad essa con formazione di metamoglobina e nitrosometemoglobina. Questo processo interferisce con la normale ossigenazione dei tessuti da parte del sangue ma, nonostante ciò, non sono mai stati riscontrati casi di decessi per avvelenamento da NO. Il biossido di azoto è più pericoloso per la salute umana, con una tossicità fino a quattro volte maggiore di quella del monossido di azoto. Forte ossidante ed irritante, il biossido di azoto esercita il suo effetto tossico principalmente sugli occhi, sulle mucose e sui polmoni. In particolare tale gas è responsabile di specifiche patologie a carico dell'apparato respiratorio (bronchiti, allergie, irritazioni, edemi polmonari che possono portare anche al decesso). I soggetti più esposti all'azione tossica sono quelli più sensibili, come i bambini e gli asmatici. Il biossido di azoto si può ritenere uno degli inquinanti atmosferici più pericolosi, non solo per la sua natura irritante sull'uomo, ma anche perché, in condizioni di forte irraggiamento solare, provoca delle reazioni fotochimiche secondarie che creano altre sostanze inquinanti ("smog fotochimico"): in particolare è un precursore dell'ozono troposferico. Inoltre, trasformandosi in presenza

di umidità in acido nitrico, esso è una delle cause della formazione delle cosiddette "piogge acide", che provocano ingenti danni alle piante e più in generale alterazioni negli equilibri ecologici ambientali.

2.1.2 *Meccanismi di formazione del particolato*

Il processo di formazione del fumo è complesso e non ancora ben compreso: le alte temperature e pressioni del gas in camera di combustione, la complessa composizione del carburante, la presenza di un ambiente turbolento e la natura non stazionaria del processo rendono difficile interpretare le fasi fondamentali della formazione del soot nel contesto della combustione nei motori Diesel moderni.

Nella letteratura scientifica si è concordi ad affermare che la fuliggine è costituita da materiali carboniosi, generati dalla combustione, sui quali vengono adsorbiti alcuni composti organici [5]. Il processo di formazione e di ossidazione del soot ha luogo all'interno del cilindro durante tutta la fase di combustione. A temperature superiori ai 500 °C, le singole particelle sono principalmente costituite da "grappoli" di numerose "sfere" di carbonio, con pochi atomi di idrogeno. Quando la temperatura scende al di sotto dei 550 °C, nelle fasi più avanzate dell'espansione e durante la fase di scarico, le particelle si rivestono adsorbendo composti organici ad alto peso molecolare che includono idrocarburi incombusti e idrocarburi ossigenati (chetoni, esteri, acidi organici, ecc.) [5]. Il materiale condensato include anche specie inorganiche come biossido di azoto, biossido di zolfo (SO₂) che a contatto con l'umidità presente in atmosfera, genera acido solforico (H₂SO₄).

Alcuni studi dividono il processo di formazione e sviluppo della fuliggine in cinque fasi:

- 1) **Pirolisi** – In condizioni di alte pressioni ed alte temperature le molecole di combustibile diventano instabili e si spezzano in piccole strutture di idrocarburi.
- 2) **Formazione di precursori in fase gassosa** – Le piccole strutture di idrocarburi formano dei precursori in fase gassosa. Le prime molecole sono principalmente particelle di acetilene, che danno inizio alla formazione di composti aromatici e policromatici (PAH).
- 3) **Nucleazione** – Le molecole gassose si condensano a formare piccole particelle solide (soot) le cui dimensioni variano da 5 nm fino ad 80 nm.

- 4) Crescita superficiale – Le particelle reagiscono con quelle circostanti adsorbendo composti organici.
- 5) Agglomerazione – Quando le particelle sono cresciute in diametro fino a diverse decine di nm, si addensano insieme a formare grappoli costituiti da migliaia di sferule con diametri che possono arrivare fino ad 1 μm .

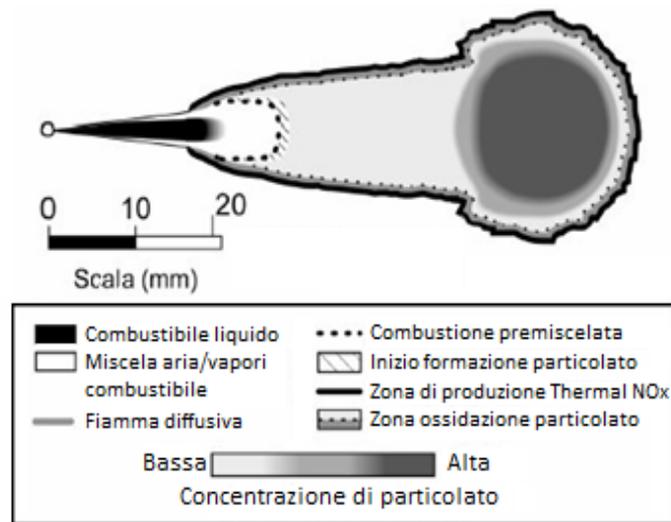


Figura 2.4 Correlazione tra concentrazione di soot ed NO_x e sviluppo della fiamma.

In Figura 2.4 è presentato un modello per la descrizione delle zone di formazione ed ossidazione del soot e dell'ossido di azoto. Il modello mostra le regioni dello spray in cui sono attese la formazione di fuliggine, l'ossidazione della fuliggine stessa e la produzione di NO durante la prima parte della combustione diffusiva. Dall'analisi della Figura si nota ancora come la formazione iniziale di soot avviene nelle vicinanze della zona in cui ha luogo la fiamma associata alla combustione premiscelata. Le prime piccole particelle di soot formate nel "cuore" dello spray crescono man mano che si muovono verso la parte terminale del getto fino a raggiungere la zona della fiamma diffusiva. La fiamma diffusiva è causa della formazione di radicali OH che sono i principali responsabili dell'ossidazione del soot [5].

Un esempio dell'evoluzione del processo di formazione e ossidazione del particolato in camera di combustione, a riprova di quanto affermato, è riportato in Figura 2.5, dove è descritto lo sviluppo della combustione in un motore diesel 4T iniezione diretta "Common Rail" otticamente accessibile.

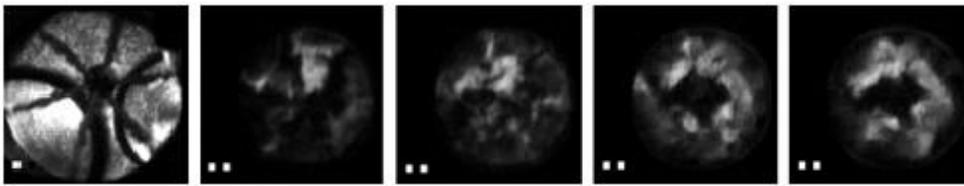


Figura 2.5 Radiazione emessa da particelle di soot incandescenti in un motore diesel "common rail" otticamente accessibile [1].

Come già accennato il soot può essere ossidato da diverse specie chimiche presenti nelle fasi finali della combustione, come O_2 , CO_2 o radicali OH; inoltre, l'ossidazione del soot è fortemente influenzato dalle condizioni di turbolenza e di temperatura presenti in camera di combustione. La turbolenza incrementa il mixing delle particelle di fuliggine con l'ossigeno o con i radicali OH; la temperatura, come è intuibile osservando la Figura 2.6, incrementa la velocità di reazione. L'estinzione della combustione dovuta all'abbassamento della temperatura durante la corsa di espansione è, infine, responsabile della insufficiente ossidazione della fuliggine prodotta.

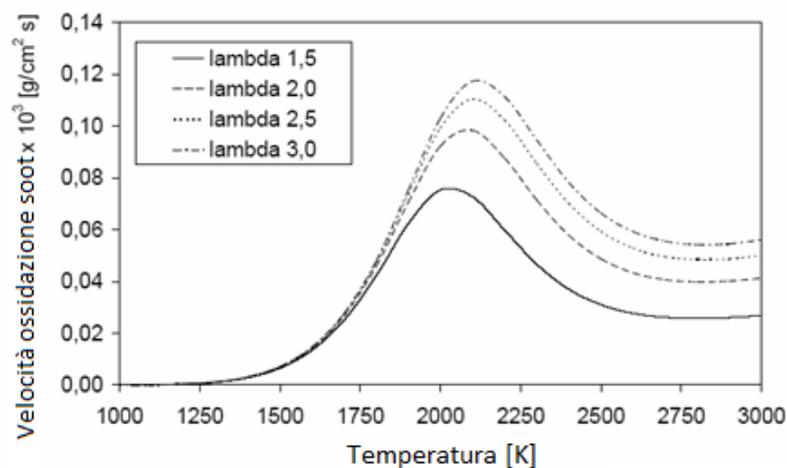


Figura 2.6 Velocità di ossidazione del soot in funzione della temperatura.

I risultati di Figura 2.6 sono riportati per diversi valori di λ (α/α_{stoch}) e quindi mostrano diverse condizioni con riferimento alla concentrazione di ossigeno.

Ulteriore risultato che si può trarre dalla letteratura scientifica è che riducendo le temperature di combustione si può ridurre la velocità di formazione della fuliggine e quindi le sue concentrazioni allo scarico. Questo aspetto rappresenta l'elemento vincente per i nuovi sistemi di combustione, in quanto la riduzione delle temperature di

combustione permette il contemporaneo abbattimento delle emissioni di ossidi di azoto e particolato durante la fase di combustione.

2.2 *La combustione HCCI*

2.2.1 *Introduzione*

La combustione HCCI (*Homogeneous charge compression ignition*) è un processo nel quale una miscela omogenea di aria e combustibile si auto-accende per compressione. L'innesco avviene, come nel caso della combustione simultanea, una volta superata la temperatura minima di autoaccensione. Tuttavia, diversamente da quanto accade nella combustione simultanea, le reazioni procedono con gradualità grazie ad opportuni accorgimenti quali, ad esempio, la diluizione della carica con gas combusti (EGR, *Exhaust Gas Recirculation*) e l'uso di un elevato rapporto aria-combustibile. La combustione HCCI è considerata una soluzione molto promettente per ridurre le emissioni inquinanti nei motori; tuttavia, a questo concetto si sono ispirate finora delle realizzazioni soltanto sperimentali. Molte ricerche sono tuttora in corso, avendo l'HCCI la potenzialità di ridurre in maniera significativa le emissioni di ossidi di azoto (NO_x) e di particolato, di garantire una elevata efficienza termica e, allo stesso tempo, di poter operare con diversi tipi di combustibili.

L'ottenimento della combustione HCCI è possibile sia con combustibili adatti a motori ad accensione comandata (A.C.), sia con combustibili per motori ad accensione spontanea (A.S.), combinando le migliori caratteristiche di ambedue le tipologie di motori. Tuttavia, ad oggi, con il funzionamento in combustione HCCI non si è ancora in grado di coprire l'intero campo di funzionamento del motore, che deve perciò essere costruito per funzionare anche in modo tradizionale, ad accensione comandata o spontanea.

Nei motori alimentati con combustibili per motori ad A.C. viene creata una carica omogenea, premiscelata, come in un normale motore ad A.C., ma la combustione HCCI si innesca grazie all'accensione spontanea, come in un motore ad A.S., dopo che vengono superate la temperatura minima di autoaccensione e il tempo di latenza (Figura 2.7). Per ottenere una combustione graduale, che non acquisisca le caratteristiche di reazione simultanea, si utilizza generalmente la diluizione della carica con gas combusti.

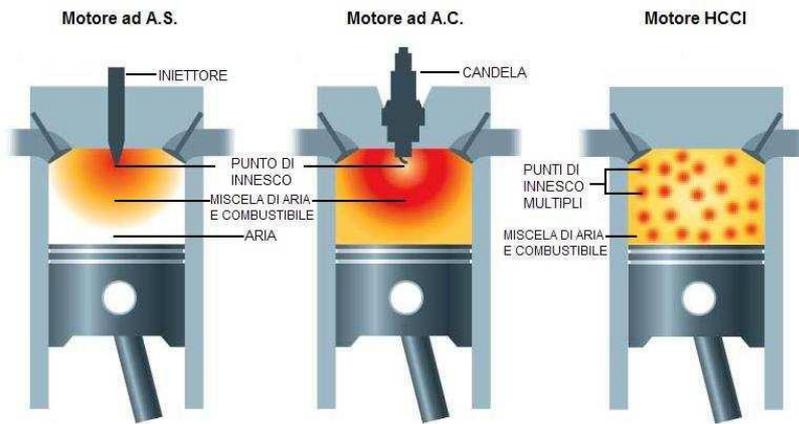


Figura 2.7 Innesco della combustione nei motori tradizionali e in quello HCCI.

È possibile associare al funzionamento un elevato valore di EGR, così da effettuare una regolazione del carico per qualità, senza ricorrere alla parzializzazione dell'aspirazione, come in un motore ad A.S.. In questo modo si riducono le perdite di pompaggio, a tutto beneficio del rendimento. Le emissioni di NO_x possono essere fortemente ridotte poiché la combustione coinvolge, quasi contemporaneamente, l'intera carica presente in camera, la temperatura cresce gradualmente e quando la stessa temperatura raggiunge i valori massimi le concentrazioni di ossigeno sono relativamente basse, non permettendo la formazione di NO_x . Inoltre, le emissioni di idrocarburi incombusti (HC) e monossido di carbonio (CO) possono diminuire, anche se non tutti i risultati sperimentali convergono su questo punto.

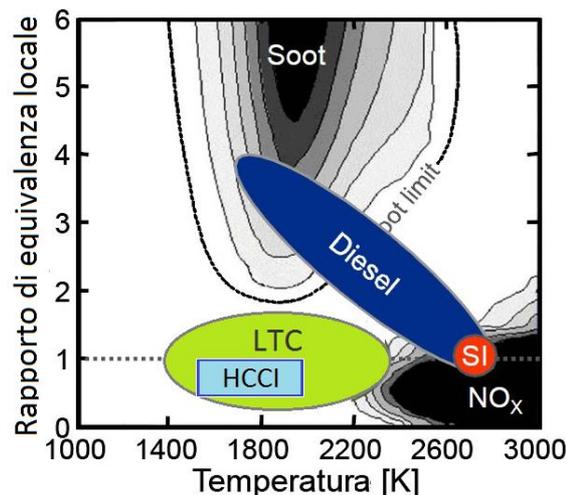


Figura 2.8 Regioni di formazione di NO_x e particolato al variare del rapporto di equivalenza e della temperatura.

Nel caso di alimentazione con combustibili per motori ad A.S. valgono le stesse considerazioni fatte a proposito dei combustibili per motori ad A.C. (miscela omogenea, autoaccensione, accorgimenti per far sì che la combustione sia graduale e non simultanea). La differenza saliente è che, al di fuori del campo di funzionamento della combustione HCCI, il motore deve funzionare con combustione diffusiva come un normale motore ad A.S., del quale deve conservare, quindi, le caratteristiche di base. Il vantaggio primario della combustione HCCI rispetto a quella diffusiva è la possibilità di minimizzare le emissioni di particolato e di NO_x perché si evita la presenza sia di zone eccessivamente ricche di combustibile (per presenza di carica omogenea), responsabili della formazione del particolato, sia di picchi locali di temperatura, responsabili della formazione di NO_x .

Accanto a questi notevoli vantaggi, la combustione HCCI presenta però alcuni inconvenienti. Essendo innescata dall'accensione spontanea della carica durante la fase di compressione, il controllo e l'ottimizzazione della fase della combustione non sono semplici. Mentre nei motori tradizionali ad A.C. o ad A.S. tale controllo è ottenuto tramite la fase di accensione o di iniezione rispettivamente, nell'HCCI l'istante di autoaccensione dipende da vari fattori quali pressione, temperatura e composizione della carica durante la fase di compressione. Così la temperatura di inizio compressione e la composizione della miscela devono essere controllate con precisione al fine di ottenere l'autoaccensione nell'istante ottimale. Un altro problema fondamentale da risolvere è l'estensione del campo di funzionamento della combustione HCCI a tutte le condizioni operative del motore, o almeno a gran parte di esse. Ai bassi carichi, nei motori alimentati con combustibili per A.C. si ha difficoltà di accensione poiché le temperature dei gas combusti sono troppo basse e non c'è sufficiente energia in essi per ottenere l'autoaccensione della carica; in quelli alimentati con combustibili per A.S. si riesce invece ad accendere la carica in virtù del rapporto di compressione maggiore e delle caratteristiche del combustibile, ma il problema è la scarsità di gas combusti come moderatori. Ai carichi più elevati, al fine di avere una sufficiente diluizione della carica per moderare la combustione, c'è bisogno di molta EGR, ma ciò ovviamente va a detrimento della carica fresca e quindi della potenza ottenibile. Se, per aggirare il problema, si adotta un elevatissimo livello di

sovralimentazione, si hanno come conseguenze un abbassamento del rendimento meccanico e la necessità di irrobustire il motore.

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

2.2.2 Cenni storici sulla combustione HCCI

I primi studi sulla combustione omogenea risalgono alla fine degli anni '70. Nel 1979 da parte di Onishi fu presentato un piccolo motore a due tempi a benzina funzionante con autoaccensione della carica, che fu prodotto in serie come generatore elettrico ed in cui questo tipo di combustione fu adottata per trasformare da negativo a positivo l'effetto dell'ingente percentuale di gas residui presenti nella carica, quando il motore funziona in condizioni di forte parzializzazione. Sono a tutti note le difficoltà di combustione nei motori a due tempi ai bassi carichi: il coefficiente di lavaggio deve necessariamente essere basso e quindi la carica viene ad essere diluita da un'elevata percentuale di gas residui che ostacolano la combustione e, al minimo, addirittura impediscono l'accensione della maggior parte dei cicli. Tuttavia, i gas residui contengono energia termica e chimica (presenza di radicali), che possono essere sfruttate proprio per ottenere l'accensione della carica. A questo fine occorre che essi non si mescolino completamente con i gas freschi, ma vengano a costituire delle piccole zone calde la cui temperatura, aumentando ulteriormente durante la fase di compressione, renda possibile la combustione dei gas freschi per contatto con la superficie di tali zone. La reazione inizia con caratteristiche di combustione omogenea (senza assumere i caratteri di combustione simultanea grazie all'effetto inibitore dei gas residui, che, una volta innescata l'accensione, rallentano la velocità di reazione, essendo inerti) in un elevato numero di piccole zone e da esse procede verso il resto della carica sotto forma di combustione progressiva distribuita. Se questo tipo di combustione, che è noto come ATAC (*Active Thermo-Atmosphere Combustion*), possa rappresentare davvero una combustione omogenea è comunque questionabile. Occorre aggiungere che il campo di funzionamento del motore con questo tipo di combustione è piuttosto limitato e quindi si deve ampiamente ricorrere al funzionamento ad A.C. Basandosi sui lavori sull'ATAC per i motori a 2 tempi, Najt e Foster nel 1983 e in

seguito Thring nel 1989 provarono la possibilità di estendere il concetto della combustione omogenea anche ai motori a quattro tempi a benzina.

2.2.3 Combustione HCCI con combustibili per motori ad A.C.

Nei motori funzionanti con combustibili adatti all'accensione comandata, l'aria e il combustibile formano una carica omogenea premiscelata; la combustione, però, invece che venire innescata da energia esterna (scintilla della candela) si genera grazie ad un'accensione spontanea, come nei normali motori ad A.S.. Per raggiungere questo scopo, la miscela deve essere esposta per un tempo superiore a quello di latenza ad una temperatura superiore a quella di autoaccensione. In modo da evitare che la combustione degeneri in simultanea è necessaria un'appropriata diluizione della carica, anche per mezzo di ricircolazione dei gas residui. In questo modo la combustione HCCI permette di ottenere un rilascio di calore accettabilmente graduale. Tali livelli di diluizione permettono al motore di operare praticamente senza parzializzazione dell'aria e quindi di ridurre il lavoro di pompaggio e la temperatura di combustione. Per questi motivi, i motori funzionanti con combustione HCCI consentono una riduzione del 15-20% del consumo di combustibile e una forte riduzione delle emissioni di NO_x se paragonati ai motori convenzionali ad A.C.. Il rendimento termico arriva ai livelli di quello di un motore ad A.S..

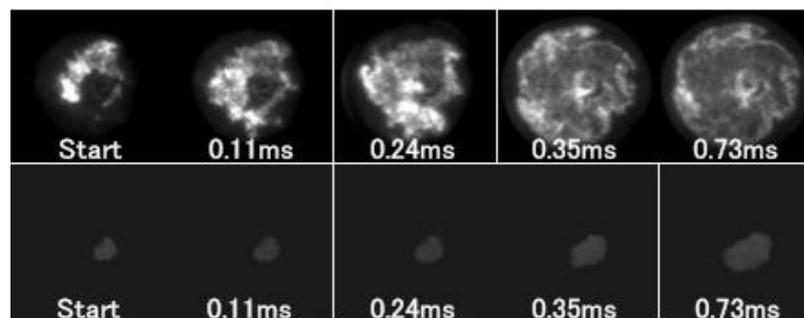


Figura 2.9 Confronto tra processi di combustione: sopra HCCI, sotto motore ad accensione comandata [1].

La combustione HCCI coinvolge in maniera più o meno omogenea l'intera carica, evitando che localmente si abbiano zone troppo ricche o troppo povere di combustibile. L'assenza di zone ricche di combustibile consente emissioni di particolato quasi nulle. Le emissioni di NO_x traggono profitto dall'assenza di alte temperature locali, dovute alle fiamme ad alta temperatura tipiche dei motori ad A.C.,

maggiori responsabili della formazione degli ossidi di azoto. Inoltre l'omogeneità della carica e la diluizione con gas residui contribuiscono a diminuire la pressione parziale dell'ossigeno. I livelli di emissioni di ossidi di azoto risultano così ben al di sotto sia di quelli di un motore ad A.C., anche considerando un eventuale funzionamento in carica stratificata, sia di quelli di un motore ad A.S..

Dai risultati sperimentali tuttavia emerge un peggioramento nelle emissioni di idrocarburi incombusti (HC) e monossido di carbonio (CO) rispetto ai motori tradizionali [6]. Infatti ai bassi carichi la temperatura di picco può essere troppo bassa (minore di 1800 °C) per completare l'ossidazione del CO in CO₂, con conseguente bassa efficienza di combustione e aumento delle emissioni di monossido di carbonio. La minore temperatura dei gas combusti può inoltre portare ad una riduzione dell'efficienza del sistema di post-trattamento dei gas di scarico.

2.2.4 Combustione HCCI con combustibili per motori ad A.S.

Le emissioni dei motori ad A.S. negli ultimi anni sono state sottoposte ad una legislazione molto restrittiva e le norme che entreranno in vigore nel 2014 imporranno un'ulteriore riduzione di NO_x e di particolato. Questo richiederà verosimilmente un ulteriore sviluppo dei sistemi di combustione, ad oggi già avanzati, e di sistemi di post-trattamento dei gas di scarico affidabili.

La combustione HCCI, come detto in precedenza, consente di ridurre le emissioni di NO_x e particolato, mantenendo l'efficienza di un motore diesel tradizionale. L'attività di ricerca sulla combustione HCCI è nata per applicazioni su motori originariamente ad A.C. ma, vista la necessità di ridurre le emissioni inquinanti dei motori ad A.S., da metà degli anni '90 è stata indirizzata anche a questi motori. Ci sono varie ragioni per cui è conveniente utilizzare motori ad A.S., soprattutto nel campo dei motori per mezzi medio-pesanti. In tali applicazioni, infatti, il funzionamento al di fuori del campo HCCI (avviamento, carichi molto bassi e carichi alti) costituisce una porzione consistente del ciclo operativo e quindi l'alimentazione a gasolio è preferibile a quella a benzina per vantaggi in termini di efficienza e minori costi di esercizio. L'elevato rapporto di compressione (maggiore di 15) dei motori ad A.S., unito alla buona propensione all'autoaccensione del combustibile diesel (elevato numero di cetano), favorisce l'autoaccensione della miscela, soprattutto ai bassi carichi

e in condizioni di minimo. Tuttavia la bassa volatilità del combustibile rende difficile la creazione della carica omogenea, necessaria per non avere particolato. Il gasolio, infatti, rispetto alla benzina, ha bisogno di elevate temperature per l'evaporazione e il miscelamento; lo stesso combustibile però ha anche una notevole reattività a bassa temperatura, che lo porta ad una rapida autoaccensione una volta che, durante la compressione, si superano gli 800 K. Il riscaldamento dell'aria aspirata sarebbe utile per facilitare la creazione della miscela omogenea, però un riscaldamento eccessivo comporta un'accensione anticipata ed una fasatura di combustione eccessivamente avanzata. È necessario quindi un compromesso per avere buon miscelamento e una corretta fasatura della combustione. Le soluzioni adottate per la formazione della carica si possono dividere in tre categorie, a seconda della metodologia con cui il combustibile viene introdotto:

- Premiscelazione;
- Iniezione diretta anticipata;
- Iniezione diretta ritardata.

2.2.4.1 Premiscelazione della carica (Premixed HCCI)

Questo approccio è forse quello più semplice e diretto per ottenere una carica omogenea. Il combustibile viene iniettato nel condotto a monte della valvola di aspirazione, in maniera simile ad un motore convenzionale ad A.C. ad iniezione indiretta.



Figura 2.10 Entrata della carica nel cilindro nel caso di iniezione indiretta nel condotto di aspirazione.

È necessario un preriscaldamento dell'aria aspirata al fine di minimizzare l'accumulo di combustibile sulle pareti del condotto e favorirne l'evaporazione. In generale, con questa soluzione, è necessario ridurre il rapporto di compressione a valori di $8 \div 13$, a seconda della temperatura e della quantità di EGR, per non avere un'accensione troppo anticipata e detonazione [7]. In condizioni non ottimali, ad esempio con temperature dell'aria aspirata inferiori ai $130\text{ }^{\circ}\text{C}$, si ha un peggioramento delle emissioni di particolato poiché l'evaporazione del combustibile non è sufficientemente rapida e la combustione investe delle gocce aventi diametro ancora troppo elevato. Questo determina anche un aumento degli HC, che in certi casi possono essere molto elevati. Nel caso in cui non venga adottato alcun riscaldamento dell'aria aspirata, può aversi una certa diluizione dell'olio lubrificante dovuta all'adesione del combustibile alle pareti del cilindro [8]. Come risultato della ridotta efficienza di combustione, del ridotto rapporto di compressione e della fase di combustione non ottimale, si ha un aumento del consumo di combustibile di circa il 30% rispetto a un motore ad A.S. ad iniezione diretta. I livelli di emissioni di NO_x risultano in ogni caso drasticamente ridotti (circa due ordini di grandezza rispetto a un diesel DI convenzionale) ed in condizioni di funzionamento ottimale in modalità HCCI anche il particolato è a livelli molto bassi [7].

2.2.4.2 *Iniezione diretta anticipata (Early DI HCCI)*

Questa soluzione è forse quella più studiata nel campo della combustione HCCI diesel. Rispetto alla premiscelazione nel condotto di aspirazione, infatti, iniettando il combustibile durante la corsa di compressione, le maggiori temperature e la maggiore densità all'interno del cilindro possono favorirne rispettivamente la vaporizzazione e il mescolamento. Questo consente di avere minori temperature dell'aria aspirata e quindi una minore propensione all'autoaccensione anticipata. Con un'attenta progettazione del processo di iniezione si può minimizzare l'accumulo di combustibile sulle pareti del cilindro che causa inefficienza di combustione e diluizione dell'olio lubrificante [8-9]. Con questo sistema inoltre è possibile utilizzare un solo sistema di alimentazione, anche se non tutti i sistemi di iniezione per il funzionamento in carica omogenea sono compatibili con il funzionamento in combustione diffusiva tradizionale. Un iniettore adatto al funzionamento in modalità HCCI deve infatti

garantire una sufficiente atomizzazione del combustibile e limitarne la penetrazione, al fine di non avere sporco delle pareti del cilindro e del cielo del pistone. Lo svantaggio principale dell'iniezione diretta rispetto alla premiscelazione è che c'è meno tempo a disposizione per miscelare il combustibile con l'aria e, meno omogenea è la carica, più elevati risultano i livelli di particolato e di NO_x. Infine, bisogna notare che il controllo della fase della combustione è di difficile attuazione: anche con un sistema DI non c'è un modo di controllare l'accensione come nei diesel convenzionali.

Tra le varie soluzioni studiate, alcune utilizzano una doppia iniezione, combinando una strategia early-DI HCCI con una iniezione tradizionale, come nel caso della ricerca svolta dal New ACE Institute: utilizzando una semplice iniezione diretta anticipata si ottenevano infatti risultati non troppo diversi rispetto al caso premixed HCCI, con emissioni di HC e consumo di combustibile superiori al diesel convenzionale, a causa della minor efficienza della combustione e dell'accensione troppo anticipata [10]. È stata dunque utilizzata una doppia iniezione, combinando una strategia early-DI HCCI con una iniezione diesel convenzionale vicino al PMS [11]. Per far ciò si usano due iniettori contrapposti montati lateralmente, in modo che gli spray collidano al centro della camera senza raggiungere le pareti per iniettare la frazione di combustibile che brucia in modalità HCCI, mentre un terzo iniettore, montato centralmente, inietta il combustibile restante vicino al PMS. Poiché la seconda combustione è in pratica simile a quella diesel convenzionale, le emissioni di NO_x e particolato risultano superiori a quelle di una combustione puramente HCCI, ma sempre inferiori rispetto ad una combustione diffusiva; gli HC invece sono superiori.

Una soluzione simile è stata sviluppata dalla Toyota, col nome di UNIBUS (*UNIform BULKy combustion System*), ed è stata messa in produzione nel 2000 su alcuni veicoli per il mercato giapponese. Tale tecnica prevede una iniezione anticipata intorno ai 50° prima del PMS ed una ritardata intorno ai 13° dopo il PMS, entrambe della stessa quantità di combustibile. Il motore opera in modalità UNIBUS fino a circa metà del carico e del regime di rotazione per poi passare alla combustione diffusiva [12]. Il sistema di iniezione è del tipo common rail ad alta pressione, il rapporto di compressione è ridotto a 12 per evitare problemi di accensione anticipata e il livello di EGR utilizzato è del 60%. La seconda iniezione aumenta in maniera significativa

l'efficienza della prima combustione HCCI e riduce HC e CO, mantenendo globalmente NO_x e particolato a livelli molto bassi per un motore diesel.

L'IFP (Institut Francais du Pétrole) ha studiato un sistema di combustione atto ad ottimizzare il funzionamento del motore in modalità HCCI ed a garantire anche un buon funzionamento con la combustione diffusiva tradizionale, necessaria ai carichi elevati [13]. È stato utilizzato un iniettore common rail ad alta pressione, con i fori dell'atomizzatore inclinati in modo da creare uno spray avente cono molto stretto e la bowl del pistone, mediante l'ausilio di simulazioni CFD, è stata progettata al fine di ottenere una buona combustione in modalità diffusiva. Poiché il rapporto di compressione utilizzato è 16, per il funzionamento in modalità HCCI sono necessari alti livelli di EGR al fine di prevenire un'accensione troppo anticipata. Riducendo il rapporto di compressione effettivo a 14, ad esempio mediante chiusura ritardata delle valvole di aspirazione, è possibile estendere il campo HCCI a carichi più elevati. Per tutte le condizioni di funzionamento in modalità HCCI le emissioni di NO_x e particolato sono rispettivamente 100 e 10 volte minori rispetto a quelle di un diesel tradizionale, mentre HC e CO sono superiori, ma sempre minori rispetto ad un motore ad A.C. a iniezione diretta. Un altro risultato interessante è la possibilità di variare la fase della combustione intervenendo su quella dell'iniezione. Anche se non c'è una correlazione diretta tra le due, la variazione dell'istante di iniezione comporta infatti delle differenze nella stratificazione del combustibile in grado di modificare l'istante di autoaccensione.

2.2.4.3 Iniezione diretta ritardata (Late DI HCCI o PCCI)

La tecnica dell'iniezione diretta ritardata, sviluppata dalla Nissan Motor Company, è conosciuta anche col nome di MK (Modulated Kinetics) [14-15]. Un motore con questo sistema è stato prodotto nel 1998 per il mercato giapponese; il campo di funzionamento in modalità MK è limitato a bassi carichi e velocità. Per ottenere una carica omogenea e diluita, necessaria al funzionamento HCCI, tutto il combustibile deve essere iniettato e ben mescolato con i gas presenti nel cilindro prima dell'autoaccensione. Per questo sono necessari un lungo ritardo di accensione e un rapido mescolamento. L'iniezione avviene 3° dopo il PMS e si fa uso di elevati livelli di EGR, tali da ridurre la concentrazione di ossigeno del 15-16%. Il rapido

mescolamento è realizzato combinando un elevato moto di swirl con una geometria toroidale del bowl sul pistone. Quando il motore funziona in modalità MK si ha una considerevole riduzione delle emissioni di NO_x senza un aumento di particolato. Anche la rumorosità viene ridotta in maniera significativa e, in aggiunta, questa soluzione rende possibile controllare la fasatura della combustione attraverso la fasatura dell'iniezione, come in un motore diesel tradizionale. È interessante notare che il rendimento termico risulta leggermente superiore in modalità MK rispetto alla combustione diesel convenzionale, anche se la combustione risulta ritardata in modo significativo: questo deriva da un minore scambio termico con le pareti, come confermato da prove sperimentali.

In seguito è stata sviluppata una seconda versione del sistema con l'intento di estendere il campo di funzionamento in modalità MK a carichi e velocità superiori [16]. Dato il carico maggiore e quindi la maggiore quantità di combustibile da iniettare, risulta più difficoltoso mantenere la durata dell'iniezione inferiore al ritardo di accensione. È stato impiegato quindi un sistema di iniezione common rail per ottenere elevate pressioni di iniezione a tutte le velocità e il rapporto di compressione è stato ridotto a 16 (dai 17.5-18 della prima versione) per aumentare il ritardo all'accensione. È anche stato aggiunto il raffreddamento dell'EGR per ridurre la temperatura dell'aria aspirata. In seguito a tali cambiamenti è stato necessario aumentare il diametro del bowl da 47 a 56 mm per minimizzare la possibilità di impingement del combustibile sul pistone. In questo modo si è ottenuta anche una significativa riduzione degli HC in condizioni di motore freddo. Il campo di funzionamento in modalità MK del sistema di seconda generazione risulta ampliato fino a circa metà del carico massimo e tre quarti del campo di velocità; le emissioni di NO_x risultano ridotte del 98% rispetto al motore convenzionale senza EGR, mentre quelle di particolato sono simili. Rispetto al motore convenzionale con EGR gli NO_x sono ridotti di circa 4-5 volte e anche le emissioni di particolato e il consumo di combustibile sono considerevolmente minori.

2.2.5 Parametri fondamentali per il controllo della combustione HCCI

La combustione HCCI è un processo che non si innesca in un punto ben preciso all'interno della camera di combustione ma ha luogo in molteplici punti coinvolgendo,

in modo più o meno omogeneo, tutta la carica presente in camera; il processo tende perciò a svolgersi molto rapidamente. Il massimo rendimento termico si ottiene quando la fasatura della combustione avviene all'interno di una piccola "finestra" di gradi di albero di manovella nella quale la somma delle perdite di calore verso le pareti e dell'entalpia dei gas di scarico raggiunge un minimo. Il picco di pressione dovrebbe trovarsi tra gli 8 e i 12 gradi dopo il PMS e, data la brevità della combustione, anche piccoli scostamenti dalla fasatura ideale possono causare una drastica diminuzione del rendimento. Tuttavia ad oggi non c'è un modo diretto di controllare l'innesco della combustione HCCI, ma quello che si riesce a fare è una sorta di controllo indiretto, ottenuto attraverso una progettazione e regolazione del motore tali da garantire le condizioni di buon innesco in un certo campo di funzionamento. Al di fuori di tale campo, soprattutto quando le condizioni variano troppo velocemente durante i transitori, non è possibile tenere sotto controllo tutti i parametri necessari a garantire una corretta combustione.

Il controllo della temperatura è fondamentale, ma essa varia in maniera significativa a causa degli elevati scambi termici tra la carica e le pareti, che a loro volta dipendono dalle condizioni operative del motore. Ai bassi carichi nei motori alimentati con combustibili per A.C. ci sono problemi di accensione poiché i gas residui non hanno energia sufficiente per garantire l'innesco della combustione. Diventa quindi necessario aumentare la quantità di EGR o procedere al riscaldamento dell'aria aspirata, al fine di aumentare la temperatura della carica. Ai carichi intermedi i gas residui, oltre a compiere la funzione di moderatori della combustione, hanno l'energia necessaria per l'accensione. Agli alti carichi invece le condizioni sono proibitive: servirebbe troppa EGR per modulare la combustione che altrimenti si trasforma in una combustione simultanea. Pertanto un funzionamento permanente in modalità HCCI nei rapidi transitori ed al di fuori di un certo campo di carichi e regimi di rotazione del motore non è ancora possibile.

Di seguito verranno analizzati nel dettaglio alcuni parametri fondamentali per l'ottenimento e il controllo della combustione HCCI, quali:

- Temperatura dell'aria aspirata;
- Rapporto di compressione;
- Exhaust Gas Recirculation (EGR);

- Moti interni alla camera di combustione;
- Sovralimentazione;
- Strategia di iniezione.

2.2.5.1 *Temperatura dell'aria aspirata*

Questo parametro è storicamente quello maggiormente studiato per il controllo della combustione HCCI: una temperatura maggiore riduce il ritardo di accensione determinando una combustione anticipata, ma il campo di controllabilità è relativamente limitato perché in molte condizioni di funzionamento l'accensione è già sufficientemente o troppo anticipata. Inoltre, la variazione della temperatura dell'aria aspirata è generalmente un processo lento a causa dell'elevata inerzia termica e non è ben sfruttabile nei transitori per compensare le variazioni di fasatura dell'auto accensione prodotte da cambiamenti di velocità di rotazione e carico del motore.

2.2.5.2 *Rapporto di compressione*

La scelta del rapporto di compressione (o dell'ottimo rapporto di compressione) non è semplice. In un motore alimentato con combustibile per A.C. un rapporto di compressione elevato, oltre a contribuire al miglioramento dell'efficienza termica, aiuterebbe di certo ad innescare l'autoaccensione ai carichi più bassi (e al minimo) ma darebbe sicuramente problemi di detonazione agli alti. In condizioni di alto carico dunque il motore deve ricorrere al funzionamento tradizionale ad A.C.. Inoltre, un aumento del rapporto di compressione determina un aumento della temperatura dei gas nel cilindro e una maggiore reattività delle specie chimiche: in questo modo la fasatura dell'autoaccensione verrebbe anticipata e il gradiente di pressione aumenterebbe drasticamente. Da prove sperimentali risulta che il miglior compromesso tra necessità di accensione e andamento del rilascio dell'energia si ha per rapporti di compressione bassi che sono favorevoli anche per un funzionamento in modalità HCCI più dolce.

2.2.5.3 *Exhaust Gas Recirculation (EGR)*

Il mezzo più pratico per controllare la temperatura della carica e l'andamento della combustione in un motore HCCI è la presenza di alti livelli di gas residui all'interno della camera di combustione, come nel caso dell'ATAC per i motori a 2 tempi. Per raggiungere questo scopo si può utilizzare un sistema esterno di ricircolo

dei gas di scarico. Tale strategia è molto semplice da implementare, ma comporta consistenti perdite di calore ed ha una lenta risposta durante i transitori. Nei motori a 4 tempi con un sistema di distribuzione a comando variabile, si può però realizzare anche un EGR interno, evitando molti dei problemi caratteristici dell'EGR esterno. Sono possibili due tipi di strategie per intrappolare i gas residui:

- strategia di riaspirazione;
- strategia di ricompressione

Per quanto riguarda la riaspirazione, i gas di scarico rientrano nel cilindro attraverso i condotti di aspirazione o di scarico, mentre nella ricompressione le valvole di scarico vengono chiuse in anticipo durante la corsa di scarico per intrappolare gas combusti nel cilindro. Per attuare la strategia di riaspirazione vengono utilizzate varie strategie di fasatura: le valvole di aspirazione possono essere aperte per poco tempo durante la corsa di scarico per intrappolare i gas nel condotto di aspirazione, oppure le valvole di scarico possono essere aperte durante la corsa di aspirazione; una terza opzione prevede di ritardare la chiusura delle valvole di scarico durante la corsa di aspirazione. Per quanto riguarda la strategia di ricompressione, le fasature che possono essere adottate sono molto semplici: le valvole di scarico vengono chiuse ben prima del punto morto superiore (PMS) durante la corsa di scarico, per intrappolare i gas residui nel cilindro, e l'apertura delle valvole di aspirazione è simmetrica rispetto al PMS. In tal modo si ottiene anche una compensazione del lavoro di ricompressione. La strategia di ricompressione è di più semplice applicazione e può facilmente essere attuata anche con un sistema di distribuzione meccanico, a fasatura e alzata variabili, mentre la strategia di riaspirazione necessita di un sistema di distribuzione completamente flessibile, ad esempio a controllo elettroidraulico e quindi ben più complesso.

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

Oltre alla quantità di EGR presente in camera di combustione, si è dimostrato un parametro influente anche l'omogeneità tra gas freschi e gas residui. A parità di tasso di EGR, infatti, una eterogeneità tra essi è desiderabile dato che (come nei motori

due tempi ATAC) la presenza di isole di gas residui caldi, garantisce la presenza di molteplici punti di accensione in camera di combustione, e permette quindi di realizzare una buona distribuzione spaziale della combustione.

2.2.5.4 *Moti interni alla camera di combustione*

La dosatura del combustibile non è sufficiente da sola a garantire buone prestazioni (coppia e potenza) del motore. Nei motori a combustione interna, soprattutto in quelli Diesel, il campo di moto all'interno del cilindro gioca un ruolo fondamentale. I dettagli relativi al campo di moto dell'aria all'interno del cilindro controllano:

- il processo di miscelamento aria-combustibile sia in termini di preparazione della carica premiscelata che in termini di evaporazione e combustione del combustibile;
- lo scambio termico con le pareti;
- la concentrazione degli inquinanti allo scarico.

Questo significa che diventa essenziale essere in grado di predire le caratteristiche del campo di moto e intervenire affinché esse favoriscano le prestazioni del motore. Questo è oggi possibile grazie sia allo sviluppo di tecniche sperimentali avanzate (anemometria a filo caldo, anemometria laser-doppler, PIV etc.) che alla disponibilità di elevate risorse computazionali e di avanzati modelli di calcolo. Il campo di moto all'interno del cilindro di un motore a combustione interna è caratterizzato dalla presenza di moti di tipo rotatorio sia su piani perpendicolari all'asse del cilindro, sia su piani passanti per tale asse. E' intervenendo su di essi che in genere si cerca di favorire il processo di formazione della carica e la combustione.

Con il termine swirl si definisce il moto rotatorio organizzato dell'aria su un piano circolare perpendicolare all'asse del cilindro (Figura 2.11). La caratterizzazione dello swirl avviene attraverso indici o coefficienti di swirl, ricavati attraverso appositi sistemi di misura. Generalmente si usa un anemometro ad elica (una ventola leggera libera di ruotare intorno al proprio asse coincidente con l'asse del cilindro) posta ad una distanza prefissata dalla testa. La velocità di rotazione della ventola, ω_s , è usata direttamente come indice di swirl oppure permette di ricavare il rapporto di swirl $R_s = \omega_s D / v_{i_s}$, dove D è l'alesaggio e v_{i_s} una velocità caratteristica

del flusso d'aria (in genere la velocità che avrebbe un flusso isoentropico dovuto al salto di pressione monte-valle della valvola di aspirazione).

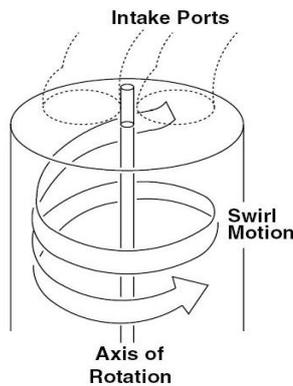


Figura 2.11 Moto di swirl [17].

Su di esso si interviene attraverso la geometria del condotto di aspirazione e del gruppo valvola/e di aspirazione:

- particolari configurazioni del condotto di aspirazione e delle valvole di aspirazione permettono la realizzazione del moto di swirl all'ingresso del cilindro:
 - schermo sulla parete della circonferenza delle valvole di aspirazione, in modo da imporre al flusso una direzione preferenziale; è un sistema che produce elevate perdite di carico, riduce la luce di efflusso, aumenta il peso delle valvole e richiede artifici per impedire la rotazione della valvola [17];
 - condotti di aspirazione orientati (Figura 2.12), tali da conferire al getto uscente dalla valvola una distribuzione di velocità non uniforme lungo la circonferenza, orientando quindi il flusso verso la parete del cilindro, che gli impone a sua volta un moto rotatorio di swirl. Sono poco efficaci alle piccole alzate, quando cioè la velocità del fluido nel condotto di aspirazione è bassa; alle grandi alzate comportano coefficienti di efflusso bassi dato che viene usata solo una parte della luce per smaltire tutta la portata (velocità non perpendicolare all'area di passaggio);

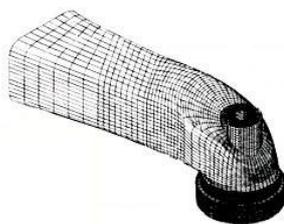


Figura 2.12 Condotto di aspirazione orientato [17].

- un condotto di aspirazione di particolare forma imprime al flusso un moto rotatorio prima dell'ingresso nel cilindro (Figura 2.13):
 - condotti elicoidali con i quali si ottengono coefficienti di efflusso migliori che con la valvola schermata e elevati rapporti di swirl anche alle piccole alzate.



Figura 2.13 Condotto di aspirazione di forma elicoidale [17].

Con il termine Tumble (Figura 2.14) si indica un moto rotatorio organizzato su un piano passante per l'asse del cilindro che si forma durante la fase di aspirazione ed è intensificato durante la fase di compressione. Il moto di tumble si forma anche senza particolari configurazioni dei condotti e delle valvole dato che è la conseguenza diretta dell'interazione del flusso d'aria entrante con la parete del cilindro.

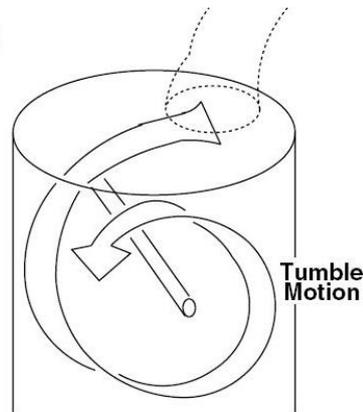


Figura 2.14 Moto di Tumble [17].

Infatti, durante la fase di aspirazione si comincia a formare un moto rotatorio organizzato in un unico vortice su un piano assiale. Durante la successiva fase di compressione, la risalita del pistone “schiaccia” il vortice, riducendone la dimensione e aumentandone l'intensità. Il vantaggio principale del moto di Tumble è quello, dunque, di aumentare il mescolamento e l'intensità di turbolenza alla fine della corsa di compressione, favorendo e accelerando il processo di combustione.

Infine il termine *Squish* (Figura 2.15) indica il moto rotatorio organizzato della carica su un piano contenente l'asse del cilindro. Lo squish si genera durante l'ultimo tratto della fase di compressione per interazione fra il flusso d'aria e le pareti del cilindro. In particolare, nei motori ad accensione comandata, è la particolare conformazione della testa del cilindro a generare lo squish, mentre nei motori ad accensione per compressione è la tazza ricavata nel pistone, a produrre un doppio vortice di squish alla fine della fase di compressione.

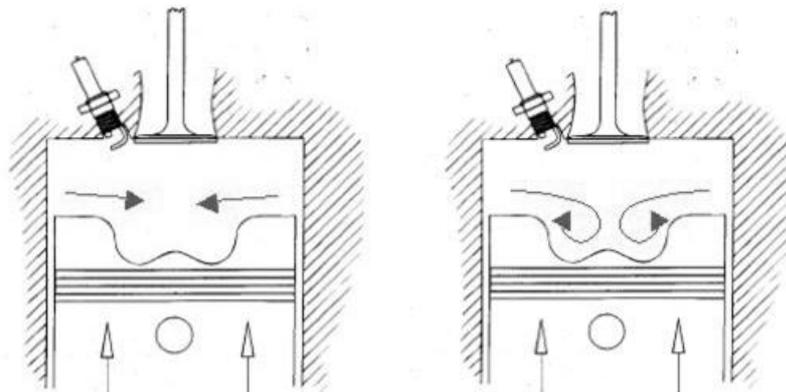


Figura 2.15 Moto di squish [17].

Nel caso dei motori Diesel il campo di moto nell'ultima fase della compressione, quando cioè comincia l'iniezione del combustibile, è prodotto dall'interazione fra il moto di swirl e il moto di squish. E' facile, dunque, comprendere l'importanza dell'intensificazione di tali moti secondari per favorire il processo di formazione della miscela (atomizzazione, diffusione ed evaporazione) e il successivo processo di combustione.



Figura 2.16 Bowl del pistone di un motore diesel [17].

2.2.5.5 Sovralimentazione

La sovralimentazione è considerata un metodo efficace per estendere il campo di funzionamento del motore in modalità HCCI verso carichi più elevati, consentendo un maggiore rapporto tra la massa di comburente e di combustibile. Tuttavia l'elevata pressione nel cilindro prodotta dalla sovralimentazione può limitare la potenziale applicazione. Con una pressione di sovralimentazione di 0,2 MPa e un rapporto di compressione di 17 è stata raggiunta una pressione media indicata (pmi) di 1,4 MPa, usando gas naturale come combustibile [18]. Aumentando la pressione di sovralimentazione e riducendo il rapporto di compressione si possono raggiungere pmi più elevate, ma con un minore rendimento a causa dell'aumento delle perdite per attrito. Le emissioni di HC diminuiscono con l'aumentare della pressione di sovralimentazione e del carico del motore, mentre quelle di CO dipendono fortemente dal rapporto comburente-combustibile e dal preriscaldamento della carica. Nell'intorno dello stechiometrico e con aria aspirata calda, le emissioni di CO sono trascurabili. In ogni caso gli NO_x sono estremamente bassi.

Ulteriori studi condotti su un motore 6 cilindri sovralimentato heavy-duty hanno dimostrato la possibilità di raggiungere carichi elevati, fino a 1,6 MPa di pressione media effettiva (pme), con emissioni di NO_x estremamente contenute.

2.2.5.6 Strategia di iniezione

Per l'ottenimento di una carica omogenea è necessario avere un certo tempo per miscelare l'aria e il combustibile. Il sistema più vantaggioso sembrerebbe quindi l'iniezione indiretta (PFI, Port Fuel Injection). Tuttavia, come detto in precedenza, questo sistema non offre alcuna possibilità di controllo della fasatura della combustione e pone un limite al massimo rapporto di compressione utilizzabile. L'iniezione diretta (DI, Direct Injection) invece permette di innalzare il rapporto di compressione (tipicamente di 1 ÷ 1,5 punti) e così anche di estendere il limite di funzionamento in modalità HCCI a un carico più basso. Inoltre questa strategia consente di variare ampiamente la fasatura dell'iniezione e con essa quella della combustione. Simulazioni CFD hanno dimostrato che la variazione della fasatura di combustione, legata a differente stratificazione della carica e dovuta a diverse fasature di iniezione, può avere un effetto significativo sulle emissioni. Usando un'iniezione anticipata, per creare

una miscela molto omogenea, si hanno emissioni di NO_x e particolato estremamente basse, ma HC abbastanza elevati. Al contrario, con un'iniezione ritardata in modo tale da avere una significativa stratificazione della carica, le emissioni di HC vengono ridotte ma i livelli di NO_x e particolato sono inaccettabili. Ottimizzando la fasatura dell'iniezione quindi si possono raggiungere bassi livelli di tutti e tre gli inquinanti sopra citati.

La ricompressione dei gas di scarico consente di ottenere un controllo della combustione HCCI attraverso un processo chiamato di pre-attivazione chimica. Iniettando il combustibile direttamente all'interno dei gas residui intrappolati e ricompresi, prima della fase di aspirazione, è possibile iniziare l'attivazione chimica in modo da accelerare il processo di autoaccensione nella successiva fase di compressione. Se s'inietta durante la ricompressione dei gas residui, essendo in aumento la temperatura e la concentrazione di combustibile, il processo di attivazione è intensificato; iniettando invece durante la loro riespansione, appena prima dell'apertura delle valvole di aspirazione, essendo in diminuzione temperatura e concentrazione, il processo di attivazione è attenuato. In questo modo, variando l'istante di iniezione del combustibile rispetto al processo di ricompressione dei gas combusti è possibile variare l'istante di autoaccensione.

2.2.5.7 *Tecnologia NADI™*

La tecnologia NADI™ (Narrow Angle Direct Injection) è attualmente in fase di studio presso diversi centri di ricerca ed università e in fase di valutazione in diversi programmi europei. Come dice il nome, si intende un motore con iniezione diretta, con l'angolo compreso tra gli spray dell'iniettore ridotto. Infatti il sistema di combustione è costituito da un iniettore il cui angolo di iniezione è molto stretto: 60° invece dei circa 150° tradizionalmente utilizzati nei motori diesel convenzionali.

Questa tipologia di angolo così ridotto impedisce al carburante impattare contro le pareti del cilindro, evitando così la contaminazione con il carburante dell'olio motore. Questa tecnologia si sposa perfettamente con la combustione HCCI, dato che per iniezioni dirette molto anticipate avere un angolo tra gli spray elevato significa iniettare il combustibile al di fuori della bowl e quindi mandarlo verso le pareti del cilindro [13].

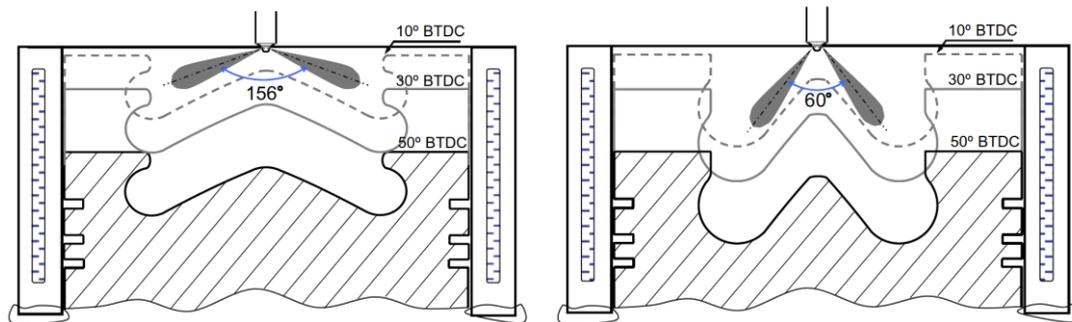


Figura 2.17 Confronto tra angolo di iniezione tradizionale (a) e con tecnologia NADI (b) [19]

2.2.5.8 Emissioni di HC e CO e loro controllo

Dalle prove sperimentali risulta che nel funzionamento in combustione HCCI il motore presenta elevate emissioni di HC e CO, soprattutto ai bassi carichi, poiché le temperature sono basse tanto che il combustibile vicino alle pareti del cilindro non brucia e non si ha una completa ossidazione del CO a CO₂. Inoltre, sempre causa delle basse temperature, si può avere una ridotta efficienza del sistema di post-trattamento dei gas di scarico. L'isolamento delle pareti, il rivestimento del catalizzatore e la riduzione degli interstizi sul cielo del pistone sono tutti accorgimenti utili a ridurre questi inconvenienti. Sovralimentazione e aumento della temperatura di aspirazione contribuiscono ulteriormente alla riduzione delle emissioni di HC. Basse temperature dei gas di scarico dovute all'utilizzo di miscele molto magre, combustione molto veloce e grande rapporto di espansione sono invece tutti ostacoli all'uso di un catalizzatore ossidante. Nel caso di combustione HCCI diesel, per un catalizzatore ossidante è necessaria una temperatura di circa 470 K o superiore per ridurre i livelli di HC a quelli di un diesel convenzionale non catalizzato. Tuttavia è importante ottenere una tale temperatura dei gas di scarico senza perdere in rendimento e senza aumentare le emissioni di NO_x.

2.2.5.9 Applicazioni

Essendo la combustione omogenea una soluzione molto promettente per la riduzione delle emissioni inquinanti, sono stati realizzati numerosi prototipi sperimentali ispirati a questo concetto. Recentemente *General Motors* ha impiegato un motore alimentato a benzina funzionante con combustione HCCI su due prototipi, la *Saturn Aura 2007* e l'*Opel Vectra*. In queste applicazioni il motore funziona con combustione HCCI solamente a basse velocità del veicolo e a carichi medio/bassi,

mentre nelle altre condizioni di funzionamento è necessaria una transizione al funzionamento ad A.C. Il consumo di combustibile viene in questo modo ridotto del 15%, ma la transizione dal funzionamento HCCI a quello tradizionale è ancora percettibile. Anche i costruttori europei stanno investendo in questo senso, in particolare *Mercedes-Benz* e *Volkswagen* rispettivamente con i motori benzina “*diesotto*” e con i motori diesel “*CCS*” e benzina “*CGP*”.

Bibliografia

- [1] Ricco M., Stumpp G., “Common Rail – An Attractive Fuel Injection System for Passenger Car DI Diesel Engines”, SAE Paper no. 960870, 1996.
- [2] Bertoli C., Migliaccio M., “Il motore diesel per la trazione stradale”, Rocco Curto Editore, 1989.
- [3] Heywood J.B., “Internal Combustion Engine Fundamentals”, McGraw-Hill, 2000.
- [4] Arcoumanis C., Bicen A.F., Whitelaw J.H., Squish and swirl-squish interaction in motored model engines; ASME Journal of Fluid Engineering; 1983; Volume 105; pp 105-112.
- [5] Dec J., “A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging”, SAE Paper 970873, 1997.
- [6] Zhao F., Asmus T. W., Assanis D. N., Dec J. E., Eng J. A., Najt P. M., “Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines, Key Research and Development Issues”, SAE International, 2003.
- [7] Gray A. W., Ryan III T. W., “Homogeneous charge compression ignition (HCCI) of diesel fuel”, SAE Technical Paper No. 971676, 1997.
- [8] Kaneko N., Ando H., Ogawa H., Miyamoto N., “Expansion of the operating range with in-cylinder water injection in a premixed charge compression ignition engine”, SAE Technical Paper No. 2002-01-1743, 2002.
- [9] Agakawa H., Miyamoto T., Harada A., Sasaki S., Shimazaki N., Hashizume T., Tsujimura K., “Approaches to solve problems of the premixed lean diesel combustion”, SAE Technical Paper No. 1999-01-0183, 1999.
- [10] Takeda Y., Nakagome K., Niimura K., “Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion with Extremely Early Staged Fuel Injection”, SAE Technical Paper No. 961163, 1996.
- [11] Hashizume T., Miyamoto T., Agakawa H., Tsujimura K., “Combustion and emissions characteristics of multiple stage diesel combustion”, SAE Technical Paper No. 980505, 1998.
- [12] Yanagihara H., “Ignition timing control at Toyota “UNIBUS” combustion system”, Proceedings of the IFP International Congress on a New Generation of Engine Combustion Processes for the Future?, pp. 34-42, 2001.
- [13] Walter B., Gatellier B., “Development of the high power NADI concept using dual mode diesel combustion to achieve zero NOx and particulate emissions”, SAE Technical Paper No. 2002-01-1744, 2002.
- [14] Kawashima JI, Ogawa H, Tsuru Y. Research on a variable swirl intake port for 4-valve high-speed DI Diesel engines. SAE paper 982680; 1998.
- [15] Kimura S, Aoki O, Ogawa H, Muranaka S, Enomoto Y. New combustion concept for ultra-clean and high-efficiency small DI diesel engines. SAE paper 1999-01-3681; 1999.

- [16] Kokjohn S.L., Reitz R.D., “A computational investigation of two-stage combustion in a light-duty engine”, SAE International, 2003.
- [17] Ubertini S., “Motori Diesel ad iniezione diretta – Alimentazione del combustibile e moto della carica”; Dispense del corso di motori a combustione interna.
- [18] Christensen M. et al., “Supercharged homogeneous charge compression ignition”, SAE Technical Paper No. 980787, 1998.
- [19] Kim MY, Lee CS. Effect of a narrow fuel spray angle and a dual injection configuration on the improvement of exhaust emissions in a HCCI diesel engine. Fuel 2007; 86: 2871-2880.

3 Il fenomeno dell'iniezione

In questo Capitolo si entrerà nel dettaglio del fenomeno dell'iniezione di combustibile liquido all'interno di camere di combustione, per studiarne dapprima la fenomenologia generale e i modelli matematici in grado di descriverlo e passare successivamente ai dispositivi utilizzati per eseguire questa importante fase. La trattazione che verrà effettuata, soprattutto riguardante i modelli matematici, riveste fondamentale importanza visto che proprio tali modelli saranno utilizzati all'interno del software di simulazione numerica scelto per lo svolgimento della presente tesi.

Altrettanto importante è lo studio della combustione conseguente al fenomeno dell'iniezione; ci si concentrerà sulle caratteristiche della combustione di uno spray, sugli accorgimenti da adottare per massimizzarne la resa energetica e minimizzare le emissioni.

Come è evidente i due fenomeni sono estremamente vincolati l'uno all'altro; l'ottenimento di un processo di combustione efficiente non può derivare che da un processo di formazione dello spray che porti ad avere un getto di combustibile estremamente fine, contraddistinto da diametri medi delle gocce il più piccoli possibile, compatibilmente con la tecnologia utilizzata. Particolare attenzione sarà data all'iniettore di tipo "*plain orifice*", del quale si è dapprima verificata l'attendibilità nel rappresentare gli iniettori utilizzati nei classici sistemi di iniezione diretta di diesel grazie alle simulazioni del solo spray, e che successivamente si è utilizzato all'interno del gruppo delle simulazioni di un motore stradale light-duty in funzionamento HCCI.

3.1 Iniezione: fenomenologia generale

L'atomizzazione è un processo che consiste nella conversione di un getto in una distribuzione più o meno uniforme di piccole gocce; la rottura avviene a causa di forze di natura esterna che sono contrastate dalla tensione superficiale del liquido e dalla sua viscosità. In assenza di forze esterne la tensione superficiale tende a far assumere alle gocce una superficie sferica, forma alla quale è associata la minore energia superficiale.

Il break-up si verifica quando la tensione superficiale e la viscosità del liquido non sono in grado di contrastare l'azione "distruttiva" delle forze esterne. In linea generale, il fenomeno può essere suddiviso in:

- break-up primario: il flusso iniettato viene frantumato in “brandelli” di dimensioni più piccole;
- break-up secondario: le strutture formatesi nel processo precedente vengono ulteriormente disintegrate in gocce di dimensioni caratteristiche più piccole.

Nel complesso queste due fasi determinano una distribuzione più o meno matematicamente prevedibile del diametro delle gocce del getto e delle velocità dello stesso, in funzione, non solo delle caratteristiche fisiche del liquido, ma anche dei parametri fisici che vengono adottati (quali ad esempio pressione e geometria del sistema di iniezione).

Nel seguito verrà posta particolare attenzione ai due metodi che vengono maggiormente utilizzati nello studio dell’iniezione: l’approccio classico, adottato quasi esclusivamente fino a pochi anni fa sia per lo studio teorico che sperimentale, e il cosiddetto approccio *prompt*. Tali metodi rivestono particolare importanza per la progettazione dei sistemi di iniezione.

3.1.1 Il Break-up

Il processo di rottura del getto generalmente include moltissime grandezze fisiche che possono essere raggruppate in gruppi adimensionali atti a descrivere il fenomeno. Uno di questi è il numero di Weber (We), rapporto tra le forze aerodinamiche distruttive ($0,5\rho_A U_R^2$) e la tensione superficiale (σD). Maggiore è il numero di Weber più elevate saranno le forze esterne distorcenti il getto paragonate all’azione da “collante” svolta dalle forze di tensione superficiale.

La condizione critica di break-up si ottiene quando queste due azioni si uguagliano; in formula, indicando con C_D il coefficiente di resistenza della goccia e con U_R la velocità relativa tra il getto e l’aria che lo circonda:

$$C_D \left(\frac{\pi}{4}\right) D^2 \cdot 0,5\rho_A U_R^2 = \pi D \sigma \quad (1)$$

Sistemando i termini della precedente equazione, si ottiene:

$$(\rho_A U_R^2 D / \sigma)_{crit} = 8 / C_D \quad (2) \quad \longrightarrow \quad We_{Crit} = 8 / C_D \quad (3)$$

Per liquidi a bassa viscosità, si ottiene sperimentalmente che il numero di Weber in prossimità del quale si manifesta il break-up si aggira intorno a 12. Invece, per una data velocità relativa il massimo diametro che non porta alla rottura è dato da:

$$D_{MAX} = \frac{12\sigma}{\rho_A U_R^2} \quad (4)$$

Quest'ultima formula è particolarmente importante visto che, in alcuni modelli, il tempo di evaporazione della goccia di combustibile è calcolabile esclusivamente a partire da D_{MAX} .

Altro parametro di fondamentale importanza è il numero di Ohnesorge (Oh) che tiene conto della viscosità del liquido (μ_L). Esso è definito come [1]:

$$Oh = \frac{(We)^{0,5}}{Re} \quad (5)$$

Visto il legame con il numero di Weber, anche il numero di Ohnesorge può essere utilizzato per individuare le condizioni che portano al break-up del getto.

3.1.2 *Il Break-up nel caso di flussi turbolenti*

In precedenza è stata fatta l'assunzione che esistesse un'elevata velocità relativa tra il getto di combustibile e l'aria nel quale lo stesso getto penetra. Tuttavia, in moltissime situazioni di interesse pratico questa situazione non si verifica: piuttosto sono le forze dinamiche di pressione del flusso di aria turbolento che determinano la dimensione massima della goccia e la distribuzione del getto. In queste condizioni, la rottura si verifica sotto la condizione:

$$We_{crit} = \frac{\rho_A \bar{U}^2 D_{MAX}}{\sigma} \quad (6)$$

avendo indicato con \bar{U} il valore medio delle fluttuazioni di velocità. Sperimentalmente si verifica che il valore di We critico si attesta intorno a 1,04 quindi molto più basso rispetto al caso precedente.

3.2 *Modello di break-up classico*

L'idea alla base di questo modello è quella che perturbazioni all'interno e sulla superficie del getto causano onde che portano alla disintegrazione della portata. Per comprendere il ruolo della viscosità, è importante riconoscere che sia all'interno del break-up primario che secondario, le instabilità hanno bisogno di un certo tempo per poter provocare la rottura. Se, per qualsiasi motivo, si allungano questi tempi, il

processo di disgregazione avverrà più lontano dall'uscita dell'atomizzatore, il che non è favorevole per un corretto processo di iniezione; il "ritardo" porta ad avere diametri delle gocce più grandi, con conseguenti maggiori tempi di evaporazione del combustibile. Un'elevata viscosità è proprio uno tra i parametri che allunga i tempi del fenomeno di rottura.

3.2.1 Il break-up di un getto liquido

Si consideri un getto laminare contraddistinto da un diametro iniziale pari a d (Figura 3.1); la crescita delle perturbazioni porta alla rottura del getto quando viene raggiunta una lunghezza d'onda delle stesse pari a [2]:

$$\lambda_{Break-Up} = 4,51d \quad (7)$$

Il break-up porta quindi alla formazione di gocce sferiche il cui diametro è pari a:

$$D = 1,89d \quad (8)$$

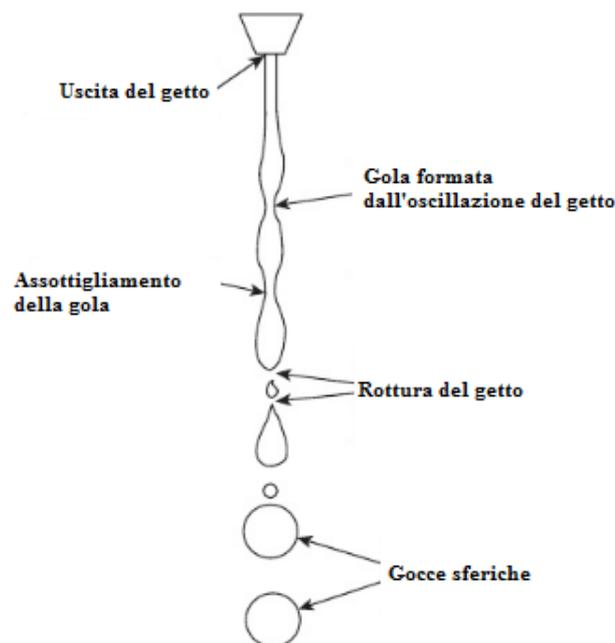


Figura 3.1 Break-up di un getto laminare.

Se si vuole tenere conto degli effetti della viscosità nel processo di disintegrazione, la lunghezza d'onda critica è calcolabile come [3]:

$$\lambda_{Break-Up} = 4,44d(1 + 30h)^{0,5} \quad (9)$$

Per bassi valori del numero di Ohnesorge il diametro delle gocce che si ottiene è molto prossimo a quello che contraddistingue un flusso laminare; gli effetti di un aumento

della viscosità, ovvero di un aumento di Oh, comportano invece un aumento della lunghezza d'onda della perturbazione che porta alla disintegrazione.

Focalizzando l'attenzione sulla velocità relativa tra getto e aria circostante si nota come un suo aumento porta alla riduzione di $\lambda_{Break-Up}$ e, quindi, del diametro medio: maggiore è la velocità relativa, più piccoli saranno i filamenti e quindi le gocce che da essi si vengono a creare. Proprio in base al valore della velocità relativa aria-getto, si possono distinguere quattro tipologie di atomizzazione:

- a basse velocità, disturbi sulla superficie del getto portano alla formazione di gocce aventi diametro caratteristico circa doppio del diametro dal quale ha origine il flusso stesso; per quanto riguarda la distribuzione nella legge del diametro si ottengono andamenti tutt'altro che uniformi;
- valori poco più alti della velocità relativa non modificano la fenomenologia che porta alla frantumazione del getto ma riduce il valore della lunghezza d'onda di break-up e, di conseguenza, del diametro medio che, in prima approssimazione, è circa pari al diametro di iniezione;
- con un'ulteriore incremento della velocità relativa, le gocce sono prodotte da una crescita instabile sulla superficie del getto delle onde perturbatrici che nascono dall'interazione con l'aria; si ottengono gocce di diametro inferiore a quello iniziale;
- a velocità relative del getto molto alte, si verificano atomizzazioni molto rapide e vicine all'iniettore con diametri molto più piccoli di quello iniziale.

Nei primi tre casi si segue “fedelmente” il modello classico di atomizzazione: il diametro delle gocce è strettamente dipendente dalla viscosità, dalla densità dell'aria circostante e dal diametro iniziale. L'ultimo caso segue quella che si definisce atomizzazione prompt, insensibile rispetto ai parametri appena riportati e dipendente soprattutto dalla tensione superficiale del liquido. Nel paragrafo che segue se ne darà una descrizione più approfondita.

3.3 Atomizzazione prompt

In tutti i casi in cui il break-up avviene molto rapidamente (per esempio, quando una corrente di aria ad elevata velocità impatta una corrente di combustibile) si ha a che fare con la cosiddetta atomizzazione “prompt”. Sotto queste condizioni, il getto non ha

il tempo di svilupparsi ma è immediatamente frantumato in una serie di strutture più piccole. In conseguenza della rapida e violenta frammentazione del combustibile, il diametro caratteristico risulta indipendente dalle condizioni iniziali del combustibile (quali il diametro iniziale) ma anche dall'azione resistente della viscosità che non ha il tempo di far sentire la propria azione, data l'istantaneità del processo.

Quindi, si può affermare che per bassi numeri di Weber (che si ottengono per basse pressioni di atomizzazione o basse velocità di efflusso tra aria e combustibile) il modello classico è il più adatto a descrivere il fenomeno di break-up; al contrario, per alti numeri di Weber (raggiungibili per alte pressioni e velocità di atomizzazione) il modello prompt è di gran lunga preferibile al precedente. Naturalmente, per un dato atomizzatore il meccanismo di break-up può cambiare a seconda delle condizioni operative.

3.4 La distribuzione del diametro delle gocce

A causa della natura random e caotica che caratterizza il processo di atomizzazione, le particelle formate dal meccanismo di frantumazione del getto hanno un'estrema variabilità per quanto riguarda il loro diametro caratteristico. Un atomizzatore commerciale può produrre uno spettro di diametri che va da pochi micron a diverse centinaia di micron: per tale ragione, oltre al diametro medio, è indispensabile studiarne anche la distribuzione.

Una semplice metodologia per studiare la distribuzione in uno spray è il plottaggio del numero di particelle aventi un diametro compreso entro un certo range (ΔD); un esempio viene riportato nella figura che segue.

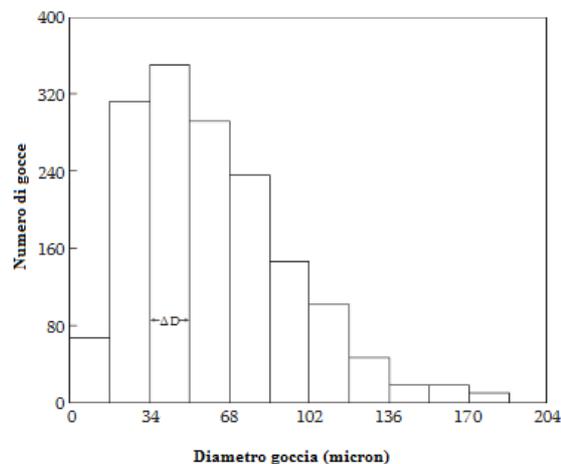


Figura 3.2 Esempio di distribuzione del diametro delle particelle.

Minore è il valore di ΔD più l'istogramma tende ad assumere la forma di una distribuzione di frequenza. Questa tipologia di curve è solitamente utilizzata per studiare le variazioni nella distribuzione del diametro al variare dei parametri operativi. Ad esempio, in Figura 3.3 viene studiato l'effetto di un aumento della pressione di iniezione sulla morfologia dell'iniettato: si può notare come tale aumento porti ad una riduzione del diametro medio del getto.

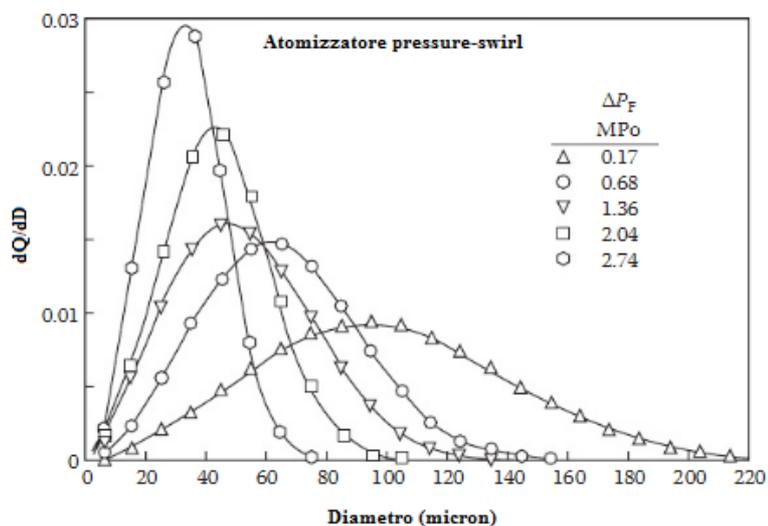


Figura 3.3 Diminuzione del diametro medio all'aumentare della pressione di iniezione.

Una distribuzione può essere anche rappresentata attraverso una curva cumulativa che è essenzialmente l'integrale della relativa curva di frequenza; in un diagramma del genere l'ordinata può essere la percentuale di droplets, l'area o il volume del getto il cui diametro è minore di un certo valore.

3.4.1 Funzioni matematiche per la distribuzione

Dal momento che i grafici relativi alla distribuzione del diametro delle particelle sono molto laboriosi da ottenere e difficilmente correlabili con risultati di origine sperimentale, di solito si preferisce sostituirli con funzioni matematiche i cui parametri possono essere ottenuti attraverso semplici e limitati campionamenti [4-8]. In assenza di qualsiasi meccanismo o modello su cui basare una legge di distribuzione del diametro, le diverse funzioni sono basate o su considerazioni di tipo probabilistico oppure esclusivamente su rilevamenti sperimentali.

3.4.1.1 Rosin-Rammler

Uno dei modelli più utilizzati nella pratica è quello sviluppato dai ricercatori Rosin e Rammler [9]; la sua formalizzazione matematica è sintetizzabile attraverso la seguente equazione:

$$1 - Q = e^{-\left(\frac{D}{X}\right)^q} \quad (10)$$

in cui Q è la frazione del volume totale contenuta nelle droplets aventi diametro inferiore a D mentre X e q sono costanti determinate per via sperimentale.

Sebbene la dimensione caratteristica delle droplets possa assumere infiniti valori, cosa che non rispecchia la realtà del fenomeno, tale modello è contraddistinto da un'elevata semplicità di utilizzo. Un andamento tipico per questa legge di distribuzione è riportato in Figura 3.4.

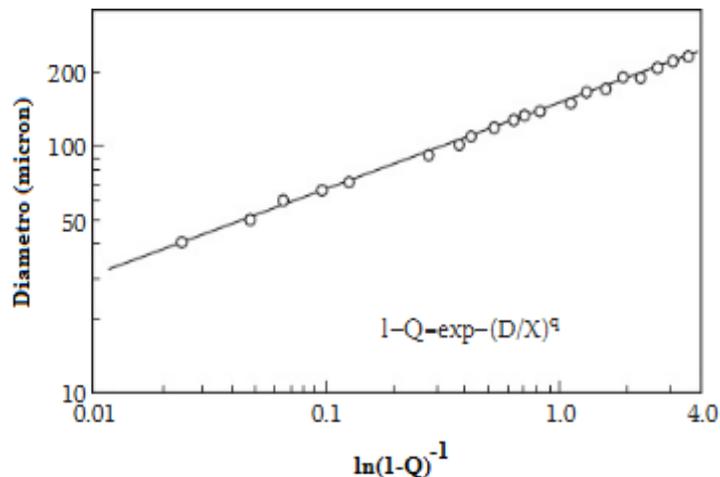


Figura 3.4 Esempio di distribuzione Rosin-Rammler.

3.5 Il diametro medio di Sauter

Nell'analisi del fenomeno dello spray molto spesso è più pratico lavorare solamente con il valore medio del diametro piuttosto che con l'intera legge della distribuzione. La più famosa formulazione in merito, è quella che porta alla definizione di diametro medio di Sauter (*SMD – Sauter Mean Diameter*): questo è il diametro di una goccia il cui rapporto tra volume e area della superficie è il medesimo di quello dell'intero spray. Tuttavia, vi sono molte possibili scelte del diametro rappresentativo dello spray, ad esempio:

- $D_{0,1}$: diametro tale che il 10% del liquido totale iniettato è contenuto in droplets di diametro minore;

- $D_{0,5}$: diametro tale che il 50% del liquido totale iniettato è contenuto in droplets di diametro minore; questo valore è anche conosciuto come diametro medio volumetrico o massico;
- $D_{0,632}$: come visto in precedenza nel paragrafo dedicato al modello di Rosin-Rammler è il diametro per cui il 63,2% del liquido totale è contenuto in gocce aventi diametro minore;
- $D_{0,9}$: diametro tale che il 90% del liquido totale iniettato è contenuto in droplets di diametro minore.

3.5.1 *Le espressioni del SMD per i vari tipi di iniettori*

Qualsiasi sia la tipologia di iniettore, il diametro medio è strettamente dipendente dalle sue dimensioni caratteristiche oltre che dalle condizioni operative. La qualità dell'atomizzazione è inoltre legata alle proprietà fisiche del combustibile utilizzato e allo stato del gas all'interno del quale lo stesso combustibile viene ad essere iniettato. Le tre proprietà del combustibile che hanno rilevanza sul processo, come visto, sono la densità, la tensione superficiale e la viscosità. La prima è quella meno rilevante sul funzionamento dell'iniettore non perché non sia importante, ma perché i combustibili commercialmente utilizzati presentano minime differenze per i valori assunti da tale parametro.

La tensione superficiale è fondamentale per il processo di frammentazione perché rappresenta la resistenza del liquido alla formazione di uno spray fine: se il fenomeno di rottura avviene nelle condizioni in cui la tensione superficiale è importante, come visto, è il numero di We il parametro più adatto a descrivere la situazione. Infine, la viscosità è la proprietà del fluido più influente. Un aumento della viscosità abbassa il numero di Reynolds all'interno dell'atomizzatore, inspessisce l'iniettato in uscita e si oppone alla frammentazione ritardandone il break-up; quest'ultimo si viene a sviluppare più lontano dal sistema di iniezione con pericolo di impingement contro le pareti del cilindro.

Passando alle condizioni ambientali, la proprietà che più ha influenza sul fenomeno è la densità: valutare l'effetto di un suo aumento è abbastanza complesso. L'aumento del numero di Weber è di per sé positivo, ma è contrastato da un aumento dell'angolo del cono caratteristico dello spray che riduce l'interazione tra il getto e l'aria

circostante e comporta un aumento dello spessore iniziale dell'iniettato. Inoltre, un aumento di densità accorcia la penetrazione del getto facendo avvenire il break-up più vicino all'iniettore, proprio dove lo spessore dello strato liquido è più elevato: visto che il SMD è proporzionale alla radice quadrata dello spessore al momento del break-up, l'aumento dello spessore comporta l'avere gocce di diametro più elevato.

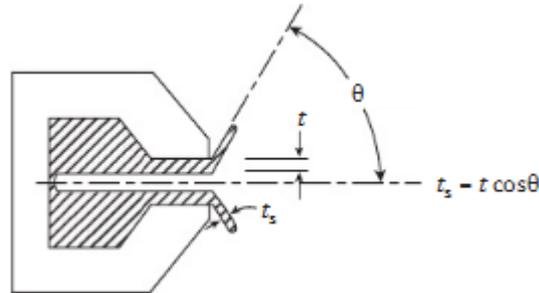


Figura 3.5 Relazione tra lo spessore iniziale e l'angolo del cono.

Quindi, un aumento della densità dell'aria può avere effetti positivi o negativi sul SMD a seconda che l'aumento del numero di We sia in grado di contrastare l'incremento dello spessore in uscita dall'iniettore.

Sfortunatamente, i processi fisici coinvolti durante l'atomizzazione non sono così chiari da permettere di esprimere il diametro medio attraverso le equazioni fondamentali della fluidodinamica. Di conseguenza, il fenomeno deve essere studiato dal punto di vista sperimentale così come di natura sperimentale sono le correlazioni tramite le quali si può ricavare il diametro medio del getto. La formulazione più efficace è quella in base alla quale il SMD è espresso in termini di gruppi adimensionali, quali il numero di Reynolds, di Weber e di Ohnesorge. A tal proposito, la maggior parte delle pubblicazioni antecedenti agli anni '70 riportano risultati che non sono affidabili a causa della scarsa precisione degli strumenti di misura utilizzati; anche i risultati di sperimentazioni recenti possono essere ritenuti affidabili solamente nel range delle proprietà dell'aria, del combustibile e delle condizioni operative effettivamente verificati. L'estrapolazione di dati relativi ad altre condizioni operative è rischiosa, visto che cambiamenti di queste variabili possono portare a risultati che non rispecchiano la realtà del fenomeno.

3.5.2 *Iniettore plain orifice*

Con questo dispositivo si provvede alla formazione del getto forzando il combustibile liquido a passare attraverso un orifizio avente un prestabilito diametro. Minore è il valore di tale diametro più fine sarà il getto. A causa dei gravi problemi che si riscontrano nel misurare le proprietà di uno spray molto denso quale quello prodotto da un iniettore di questo tipo, esistono poche correlazioni per il SMD. Quella riportata di seguito (Elkottb) è quella maggiormente utilizzata [10]:

$$SMD = 3,08 \nu^{0,385} (\sigma \rho_L)^{0,737} \rho_A^{0,06} \Delta P_L^{-0,54} \quad (11)$$

in cui ν , ρ_L e ΔP_L sono rispettivamente la viscosità, la densità e il salto di pressione relativi al combustibile liquido, ρ_A la densità dell'aria circostante.

3.5.3 *Commenti sulle varie espressioni per il SMD*

La letteratura è in grado di fornire centinaia di espressioni e correlazioni per predire il diametro medio delle gocce prodotte dalle varie tipologie di iniettori. Tutte queste equazioni devono essere utilizzate con cautela e particolare riguardo deve essere dato all'accuratezza dei dati sperimentali, ai range delle proprietà di aria e combustibile, alle condizioni operative con le quali si trova ad operare un iniettore.

Inoltre, come detto, di fondamentale importanza è la modalità con la quale il fenomeno viene a svilupparsi: equazioni che valgono esclusivamente per il modello classico possono essere usate solamente quando si sono sviluppate completamente le condizioni tipiche di questo fenomeno; stessa cosa vale, ovviamente, quando è il modello prompt a poter/dover essere usato.

In particolare, con riferimento agli iniettori plain-orifice, se la pressione differenziale operativa è di circa 10 bar (1 MPa), è predominante il modello classico e sono i fenomeni legati alla viscosità che guidano il break-up. Con un aumento della pressione differenziale si passa gradualmente dal modello classico a quello prompt e, per circa 30 bar, è dominante il meccanismo prompt e la dimensione caratteristica delle gocce è strettamente dipendente dalla tensione superficiale del liquido e non più dalla viscosità.

3.6 Cavitazione all'interno dell'iniettore

Per quanto riguarda le caratteristiche geometriche dell'iniettore, sono le seguenti grandezze ad influenzare il break-up del combustibile:

- diametro dei fori di iniezione: determina per larga parte le dimensioni iniziali e la velocità del getto;
- rapporto lunghezza/diametro degli ugelli, l/D ;
- raggio di curvatura all'imbocco degli ugelli, r .

I parametri l/D e r influenzano le condizioni di moto all'interno dell'ugello, determinando il coefficiente di efflusso e le instabilità superficiali iniziali. Nei sistemi di iniezione di ultima generazione, inoltre, le elevate velocità dello spray portano spesso all'insorgenza di fenomeni di cavitazione all'interno dell'iniettore, in conseguenza dei quali il getto è polverizzato nelle immediate vicinanze dell'iniettore. La recente sperimentazione, infatti, ha confermato che nei nuovi sistemi di iniezione ad alta pressione un getto ad altissima velocità entra in camera di combustione e viene disintegrato nelle immediate vicinanze dell'iniettore in gocce di varie dimensioni. Il solo effetto delle forze aerodinamiche e di quelle indotte dalla turbolenza non è in grado di giustificare questo tipo di meccanismo, per il quale l'atomizzazione si suppone cominci già all'interno dell'iniettore: le elevate pressioni di esercizio e le conseguenti elevate velocità di iniezione sono causa di flussi cavitanti all'interno del polverizzatore (Figura 3.6). Quindi, sul verificarsi di tale fenomeno hanno un'influenza significativa sia le condizioni dell'efflusso sia la geometria dell'iniettore.

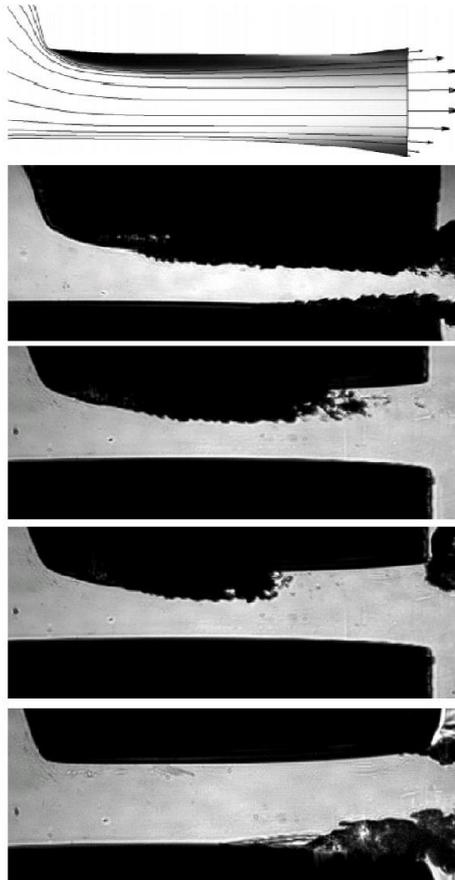


Figura 3.6 Cavitazione all'interno dell'iniettore [11].

3.7 Il coefficiente di efflusso

Il coefficiente di efflusso C_D è definibile attraverso la seguente equazione, in cui m_F è la portata in massa di combustibile, A_0 è l'area della sezione di uscita dell'ugello, ρ_F e ΔP_F sono rispettivamente la densità del fuel ed il salto di pressione cui esso è sottoposto:

$$m_F = C_D A_0 (2\rho_F \Delta P_F)^{0,5} = 1,11 C_D d_0 (\rho_F \Delta P_F)^{0,5} \quad (12)$$

Il suo valore dipende sia dalle perdite di pressione all'interno dell'iniettore che dalla misura con la quale il combustibile "utilizza" l'intera area della sezione di uscita dello stesso.

Per quanto riguarda gli atomizzatori *plain orifice*, misure del coefficiente di efflusso effettuate su varie configurazioni dell'orifizio in un ampio range di condizioni operative indicano che i parametri aventi maggiore influenza sono il numero di Reynolds, il rapporto lunghezza-diametro, la pressione differenziale di iniezione, il

raggio di raccordo della smussatura e la cavitazione. Per flussi non cavitanti, è stato dimostrato come tale coefficiente aumenti con il numero di Reynolds, fino a raggiungere un massimo per $Re \sim 7000$. Oltre tale valore, il valore di C_D rimane pressoché costante e indipendente da Reynolds. In Figura 3.7 si riporta l'andamento dei valori massimi per il coefficiente di efflusso in funzione del rapporto l_0/d_0 . Dall'analisi di tale figura si evince come $C_{D(MAX)}$ aumenti da circa 0,61 a 0,81 nel passaggio di l_0/d_0 da 0 a 2. Con un ulteriore aumento di tale rapporto si verifica una diminuzione che segue una legge pressoché lineare, fino ad un valore di 0,74 ottenuto per $\frac{l_0}{d_0} = 10$. Per tale range di l_0/d_0 la seguente espressione approssima i dati sperimentali con un errore di circa l'1% [12]:

$$C_{D(MAX)} = 0,827 - 0,0085 \left(\frac{l_0}{d_0} \right) \quad (13)$$

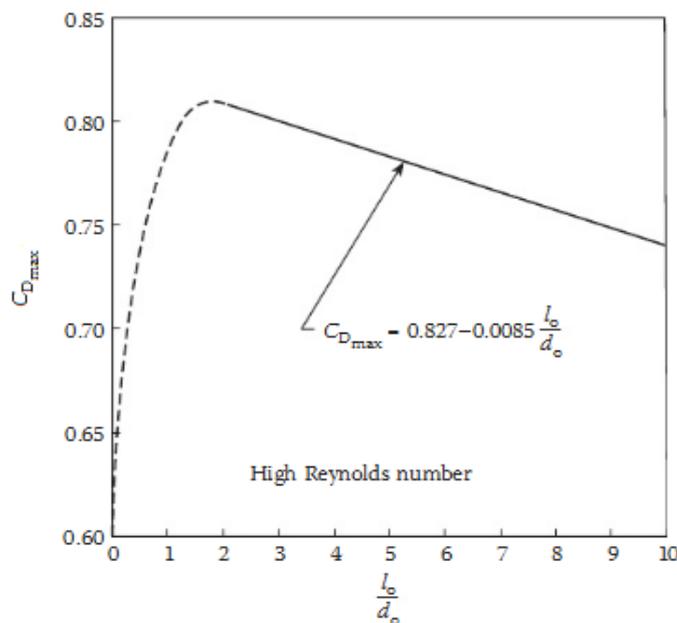


Figura 3.7 Relazione tra $C_{D_{MAX}}$ e il rapporto lunghezza/diametro dell'iniettore.

Nelle regioni del flusso contraddistinte da una bassa pressione statica (ovvero da alte velocità di smaltimento della portata), vapori o gas possono essere rilasciati dal combustibile sotto forma di bolle che hanno un effetto molto significativo sul coefficiente di efflusso: in questi casi sono molto probabili fenomeni di cavitazione del liquido e C_D è governato essenzialmente dalla pressione di vapore e dal salto di pressione attraverso l'ugello. Naturalmente, la cavitazione non ha influenza solamente sul coefficiente di efflusso: è stato dimostrato che, quando presente, la cavitazione ha

un'influenza superiore anche alla turbolenza nel favorire i disturbi iniziali necessari al break-up.

3.8 Penetrazione del getto

Una delle caratteristiche principali di uno spray è la sua penetrazione, cioè la lunghezza del getto a partire dall'ugello di iniezione. E' ovvio che lo spray per essere efficace deve penetrare a fondo nella camera di combustione e diffondere il più possibile il combustibile nel volume occupato dal comburente, compatibilmente con i problemi di impingement delle pareti solide della camera stessa. La penetrazione dipende dalla velocità iniziale e dal diametro delle gocce ed è fortemente influenzata dalla struttura del getto e dall'interazione aria-spray. La penetrazione, dunque, aumenta:

- al diminuire della massa volumica dell'aria ρ_A e quindi al diminuire della contropressione;
- all'aumentare del diametro della goccia, d_g per effetto di una migliore aerodinamica;
- all'aumentare della pressione di iniezione: quest'ultima ha un effetto duale dato che un suo aumento comporta un aumento della velocità iniziale e una maggiore polverizzazione del getto (e quindi gocce più piccole); tuttavia, la sperimentazione mostra però che il primo effetto è prevalente rispetto al secondo;

Per quanto detto, tutto ciò che favorisce la polverizzazione esercita un effetto opposto sulla penetrazione. Negli iniettori di ultima generazione l'aumento della penetrazione dovuto alle altissime velocità iniziali è stato in parte compensato dall'instaurarsi di fenomeni di cavitazione all'interno dell'iniettore che producono una polverizzazione del getto subito dopo l'ugello.

3.9 Angolo di apertura del cono dello spray

L'angolo del cono è definibile come l'angolo formato da due linee che si intersecano all'uscita dall'iniettore e che ad una definita distanza da esso contengono interamente lo spray (Figura 3.8).

Un importante aspetto, oltre la distribuzione della dimensione delle gocce, è di assicurare che lo spray formato dall'atomizzazione assuma una forma simmetrica all'uscita dall'iniettore. In generale, un incremento dell'angolo del cono aumenta l'esposizione delle gocce nei confronti dell'aria circostante, migliorando la stessa

atomizzazione e permettendo un migliore mixing e un più efficace trasferimento di calore.

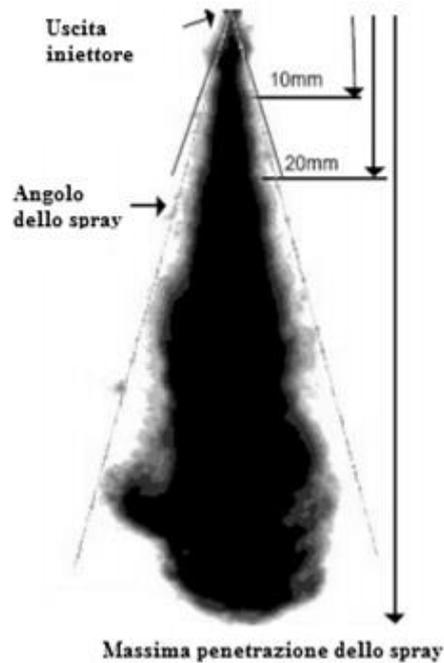


Figura 3.8 Penetrazione massima e angolo del cono di uno spray [11].

Con un iniettore del tipo *plain orifice* l'angolo di spray è abbastanza basso e le gocce risultano essere uniformemente distribuite in tutto il volume occupato. Diverse formule sono state ottenute per esprimere l'angolo dello spray in funzione delle dimensioni dell'ugello e delle principali proprietà fisiche sia dell'aria che del combustibile; la più semplice di esse è quella proposta da Abramovich [13]:

$$\operatorname{tg}(\theta) = 0,13 \left(1 + \frac{\rho_A}{\rho_L} \right) \quad (14)$$

Mentre la precedente non include alcun parametro operativo che riguardi il processo di atomizzazione vero e proprio, il grafico della Figura 3.9 mostra gli effetti della pressione differenziale e del rapporto tra il raggio di curvatura interno dell'ugello e il diametro dello stesso.

Tra i principali risultati di questi studi emerge che l'angolo aumenta sia nel caso di incrementi della pressione di iniezione sia nel caso di bordi dell'iniettore in uscita molto "raccordati" quindi contraddistinti da piccoli raggi di raccordo, mentre è poco dipendente dalla pressione differenziale di iniezione nel caso di grandi raggi di raccordo.

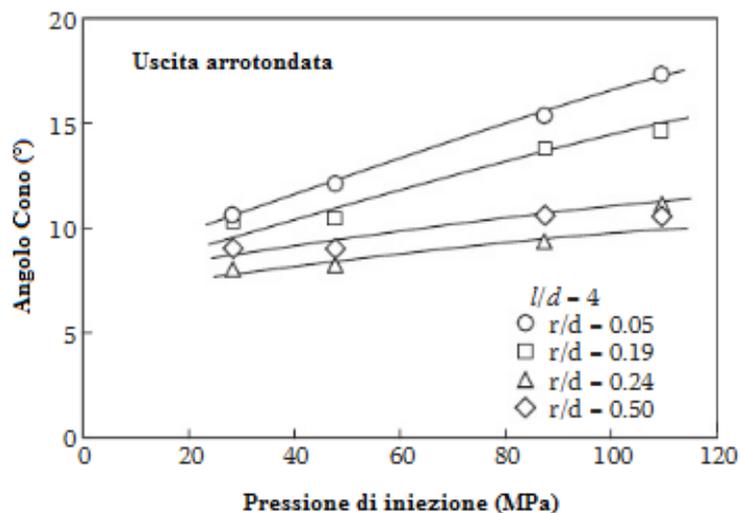


Figura 3.9 Angolo di spray in funzione della pressione di iniezione (curve parametrizzate tramite il rapporto r/d) [14].

3.10 Classificazione dei sistemi di iniezione

Diversi sistemi di iniezione sono stati sviluppati per i motori Diesel negli ultimi decenni, generalmente classificati come segue:

- 1) sistema di iniezione con una pompa per cilindro che fornisce all'istante e per il tempo necessari la portata di combustibile richiesta all'iniettore corrispondente; in questo caso la pompa è responsabile della pressione di iniezione, della quantità di combustibile iniettata e della fasatura, mentre gli iniettori, ad apertura automatica, sono responsabili delle caratteristiche dello spray;
- 2) sistema di iniezione con pompa singola e distributore in cui un'unica pompa fornisce il combustibile con pressione e portata adeguate a tutti gli iniettori ad apertura automatica e un distributore apre il collegamento fra la mandata della pompa e l'iniettore che deve aprire, occupandosi in parte della fasatura;
- 3) sistema di iniezione con accumulatore di pressione in cui un'unica pompa di alimentazione fornisce continuamente combustibile in pressione all'accumulatore stesso da cui si dipartono i collegamenti con gli iniettori ad apertura comandata; l'accumulatore ha la funzione di smorzare le oscillazioni di pressione, mentre gli iniettori sono responsabili della quantità di combustibile iniettata, della fasatura e delle caratteristiche dello spray e la pompa fornisce soltanto la pressione di iniezione adeguata; possono rientrare in questa classe anche i sistemi con accumulo a bassa pressione e con iniettori-pompa, in cui cioè gran parte della pressione di iniezione è

ottenuta attraverso un pompante posto in corrispondenza dell'iniettore o attraverso lo spillo dell'iniettore stesso;

- 4) sistema di iniezione con accumulatore e distributore la cui unica differenza con il precedente è la presenza di un distributore a valle dell'accumulatore che apre i collegamenti con i vari iniettori ad apertura automatica all'istante e per il tempo desiderati.

In passato i motori Diesel erano tutti equipaggiati con sistemi di iniezione meccanica. Del tipo 1 era il sistema di iniezione con pompa con un numero di pompanti alternativi con pistone rotante pari al numero dei cilindri. Nei motori più piccoli si adottava il sistema 2, in cui un unico pompante alternativo fornisce la pressione di iniezione e la portata di combustibile e la distribuzione del combustibile fra i vari iniettori è realizzata con un moto rotatorio del pompante stesso. Successivamente il controllo elettronico è stato adottato per i sistemi di iniezione suddetti con un miglioramento sensibile soprattutto in termini di accuratezza dei parametri di iniezione.

3.10.1 Il sistema common rail

Il più grande avanzamento tecnologico per i motori Diesel per autotrazione è stato il sistema di iniezione elettronica con Common Rail (CR) (Figura 3.10), lanciato come progetto verso metà degli anni '80 dal gruppo FIAT, al fine di realizzare un sistema di iniezione diretta tecnologicamente evoluto. Nel 1990 inizia l'attività di pre-industrializzazione, che viene completata nel 1993. Nel 1994 il progetto venne ceduto al gruppo Bosch e nel 1997 il sistema entrò nel mercato

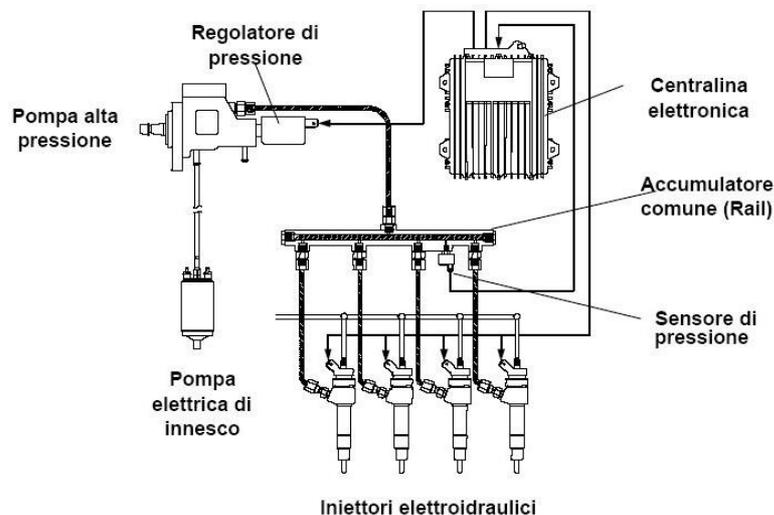


Figura 3.10 Schema di un sistema di iniezione con Common Rail [11].

A differenza dei sistemi classici, il Common Rail prevede che la generazione di pressione sia disaccoppiata rispetto all'iniezione: ciò significa che la pressione viene generata indipendentemente dal numero di giri e dalla quantità di carburante e può essere selezionata all'interno di un intervallo prefissato (attualmente da 150 a 1800 bar). Il componente che rende possibile il disaccoppiamento è l'accumulatore ad alta pressione; gli iniettori sono ad apertura comandata elettricamente tramite solenoide. Il sistema è gestito in modo completamente elettronico e consente la generazione di iniezioni multiple (pilota, principale, post-iniezione).

Oggi i motori Diesel competono in termini di prestazioni con quelli ad accensione comandata, garantendo nel contempo consumi specifici nettamente inferiori proprio grazie all'adozione di un simile sistema. L'introduzione del sistema CR consente:

- elevate pressioni di iniezione, fino a 1600 bar nei sistemi già industrializzati e fino a 1800 bar in quelli di nuova generazione;
- controllo della pressione e dei parametri di iniezione (*“free mapping”*) indipendente dal regime di rotazione del motore e in funzione di un gran numero di parametri motoristici e operativi.

Il sistema common-rail è costituito da:

- un circuito idraulico di alta pressione costituito dalla pompa di alta pressione, dall'accumulatore comune, dagli elettroiniettori e dai vari condotti;
- un circuito idraulico di bassa pressione costituito da un elettropompa, da più stadi di filtraggio e dai vari condotti di mandata e di ritorno;
- una centralina elettronica, a cui sono collegati i sensori di pressione.

Per quanto riguarda gli elettroiniettori (Figura 3.11) sono ad apertura comandata da un attuatore elettromagnetico a solenoide (integrato nel corpo di ogni elettroiniettore).

Gli elementi fondamentali di un elettroiniettore sono:

- il polverizzatore multi foro (Figura 3.12-a), di tipo VCO (*Valve Covered Orifice*, cioè con i fori otturati direttamente dallo spillo) o di tipo Mini-Sac (Figura 3.12-b), in cui i fori sono alimentati da un piccolo volume a valle della zona di tenuta

tra lo spillo e la sua sede; lo spillo è tenuto in posizione chiusa, a riposo, da una molla;

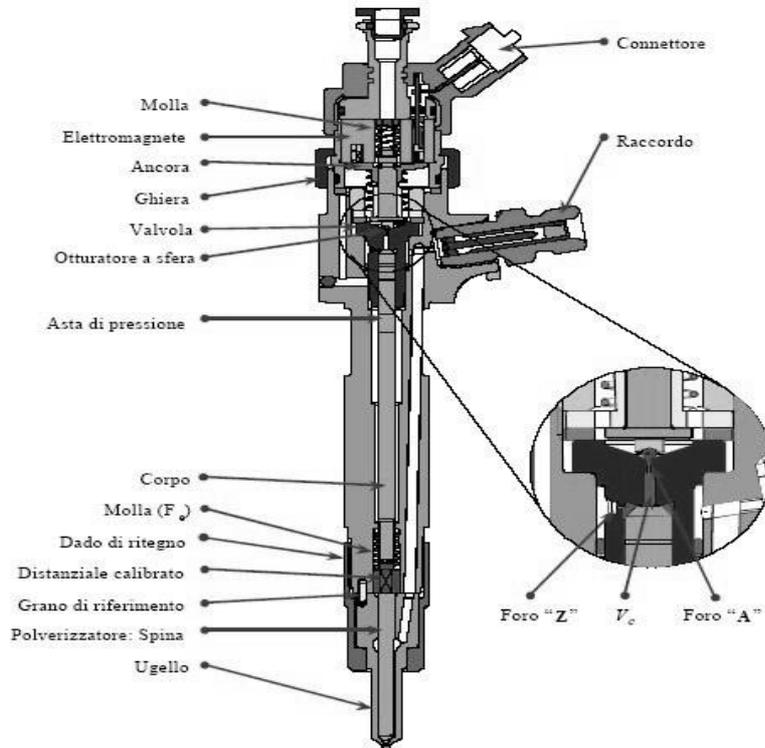


Figura 3.11 Schema di un elettroiniettore [11].

- l'asta di pressione, il cui moto è controllato dalla pressione esistente nel piccolo volume di controllo posto sulla sua parte superiore; la legge di variazione della pressione nel volume di controllo è determinata dai due fori calibrati A e Z, che regolano l'afflusso e il deflusso di combustibile;
- l'elettrovalvola, posta nella parte superiore dell'iniettore, che ha la funzione di scoprire il foro A per realizzare l'iniezione.

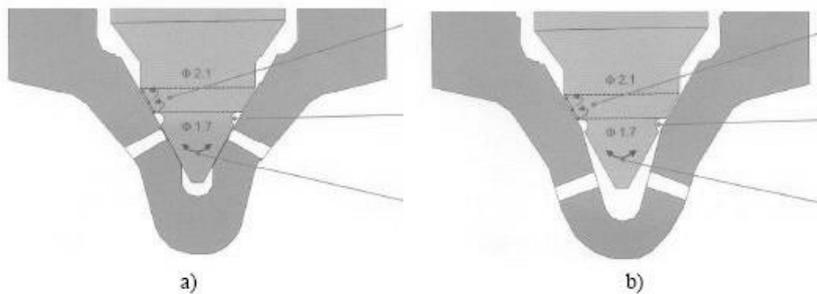


Figura 3.12 Confronto fra iniettore VCO (a) e Mini-Sac (b) [11]

In base ai valori rilevati dai sensori e utilizzando le mappature interne alla sua memoria, la centralina decide la strategia di intervento e di correzione dei tempi base di iniezione, agendo sugli attuatori.

Una nuova centralina elettronica, denominata MULTIJET, montata attualmente nei veicoli del gruppo FIAT permette una gestione ancor più flessibile delle modalità di comando dell'iniezione, aumentando il numero di iniezioni effettuabili nell'ambito di un ciclo motore rispetto al sistema precedentemente in produzione, denominato UNIJET.

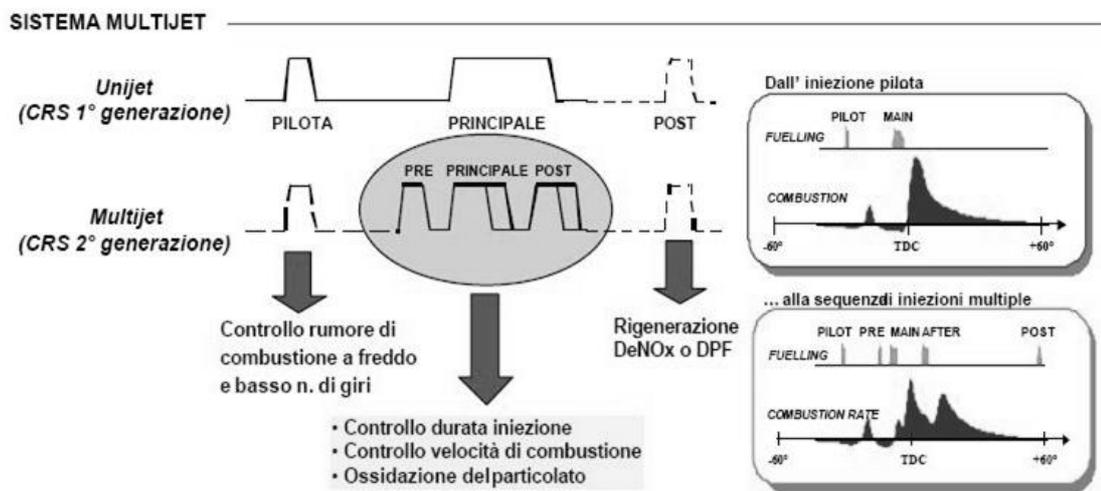


Figura 3.13 Esempio di segnale Unijet vs segnale multijet con strategia a 5 iniezioni [11]

Le diverse iniezioni che la nuova generazione del sistema Common Rail consentirà di attuare, sono le seguenti (Figura 3.13):

- 1) iniezione pilota: effettuata con elevato anticipo rispetto all'iniezione principale, permette di ridurre drasticamente il rumore di combustione, migliora l'avviabilità a freddo e produce un incremento della coppia ai bassi regimi a scapito di un certo peggioramento del particolato;
- 2) pre-iniezione: effettuata con bassissimi valori di anticipo rispetto all'iniezione principale, permette, insieme alla post iniezione, di modulare l'andamento della combustione contenendo le emissioni di inquinanti;
- 3) iniezione main: iniezione principale la cui durata può essere gestita indipendentemente dalla pressione di iniezione;
- 4) post iniezione; con questo termine si indica un'iniezione effettuata subito dopo l'iniezione principale, con analoghe finalità a quelle della pre-iniezione;

- 5) post-iniezione: ulteriore iniezione effettuata nelle ultime fasi della combustione allo scopo di aumentare le temperature di scarico, permettendo (periodicamente) la rigenerazione della trappola per il particolato. La post-iniezione può inoltre creare un ambiente riducente necessario per la rigenerazione del catalizzatore DeNO_x per l'abbattimento degli ossidi di azoto.

Bibliografia

- [1] Hinze J.O., "Fundamentals of the hydrodynamic mechanism of splitting in dispersion processes", *AIChE Journal*, Vol. 1, No. 3, pp 289-95, 1995.
- [2] Rayleigh L. "On the instability of jets", *Proceedings of London mathematical Society*, Vol. 10, pp 4-13, 1878.
- [3] Weber C., "Disintegration of liquid jets", *Zeitschrift fur Angewandte mathematik und mechanik*, Vol. 11, No 2, pp 136-59, 1931.
- [4] Mugele W.R., Evans H.D., "Droplet size distributions in sprays", *Journal of industrial and engineering chemistry*, Vol. 43, No. 6, pp. 1317-24, 1951.
- [5] Marshall W.R., "Mathematical representation of drop-size distributions of sprays", *Atomization and spray drying*, Chapter VI, *Chemical Engineering progress monograph series*, Vol. 50, No. 2, American institute of chemical engineers, Pittsburgh, PA, pp. 215-48, 1954.
- [6] Miesse C.C, Putnam A.A., "Mathematical expressions for drop-size distributions", *Injection and combustion of liquid fuel*, Section II, WADC technical report 56-344, Battelle Memorial institute, Columbus, OH, March 1957.
- [7] Bhatia J.C., Domnick J., Durst F., Tropea C., "Phase-doppler anemometry and the log-hyperbolic distribution applied to liquid sprays", *Particle system characterization*, Vol. 5, pp. 153-64, 1988.
- [8] Ahmadi M., Sellens R.W., "A simplified Maximum entropy based drop size distribution", *Atomization and sprays*, Vol. 3, No. 3, pp. 291-310, 1993.
- [9] Rosin P., Rammler E., "The laws governing the fineness of powdered coal", *Journal of the institute of fuel*, Vol. 7, NO. 31, pp 29-36, 1933.
- [10] Elkotb M.M., "Fuel atomization for spray modeling", *Progress in energy and combustion science*, Vol. 8, pp. 61-91, 1982.
- [11] Ubertini S., "Motori Diesel ad iniezione diretta – Alimentazione del combustibile e moto della carica"; *Dispense del corso di motori a combustione interna*.
- [12] Lichtarowicz A., Duggins R.K., Markland E., "Discharge coefficients for incompressible non-cavitating flow through long orifices", *Journal of mechanical engineers*, Vol. 173, No. 25, pp. 655-60, 1959.
- [13] Abramovich G.N., "Theory of turbulent jets", MIT Press, Cambridge, MA, 1963.
- [14] Ohrn T.R., Senser D.W. Lefebvre A.H., "Geometrical effects on spray cone angle for plain-orifice atomizers", *Atomization and sprays*, Vol. 1, No. 3pp. 253-68, 1991.

4 Teoria di base della CFD

4.1 Introduzione

Come noto, i regimi con cui si può sviluppare il moto di un fluido sono due: laminare e turbolento. Il primo è caratterizzato da una regolarità che ne permette una descrizione fisico-matematica puntuale: strati infinitesimi di fluido scorrono l'uno sull'altro senza che si verifichi alcun rimescolamento. Al contrario, quando le forze viscosse non sono in grado di contrastare le forze d'inerzia, il moto si sviluppa in maniera caotica senza seguire traiettorie prevedibili. Nelle applicazioni industriali sono solamente i moti turbolenti ad essere presi in considerazione, grazie alla loro capacità di mescolamento e grazie ad un'elevata capacità di trasferimento di potenza termica specifica. Per tali ragioni di seguito verranno sinteticamente riportate le equazioni che caratterizzano i fenomeni turbolenti e che tengono conto anche delle reazioni chimiche che si possono sviluppare all'interno del flusso [1-3].

4.2 Equazioni di trasporto

Per poter modellare qualsiasi tipo di fenomeno è necessario conoscere le equazioni di conservazione delle principali grandezze all'interno del volume di controllo preso ad esame. Per una generica grandezza Φ è possibile scrivere l'equazione di conservazione nella forma generale:

$$\int \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV + \int \rho\phi\bar{u} \cdot \bar{n} dS = \int \bar{Q}_s(\phi) \cdot \bar{n} dS + \int Q_V(\phi) dV \quad (1)$$

Il primo integrale di volume rappresenta la velocità di cambiamento della grandezza all'interno del volume di controllo, mentre il secondo addendo è il suo flusso convettivo attraverso la superficie S , legato alla velocità convettiva del fluido. La somma di questi due termini è pari alla somma del flusso diffusivo e del termine di produzione, riportati a secondo membro dell'equazione. Applicando l'equazione di Green-Gauss per la trasformazione degli integrali di superficie in integrali di volume e considerando a questo punto un volume di controllo infinitesimo, si è in grado di formulare la precedente in termini differenziali, che gode della proprietà di essere indipendente dal sistema di riferimento:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \nabla(\rho\phi\bar{u}) = \nabla\bar{Q}_s(\phi) + Q_V(\phi) \quad (2)$$

Le equazioni di conservazione della massa, della quantità di moto, delle specie e dell'energia che verranno di seguito riportate possono essere ricavate direttamente dalla precedente formulazione.

4.2.1 Equazione di conservazione della massa

L'equazione di conservazione della massa, detta anche di continuità, si ottiene in forma integrale direttamente dalla precedente:

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int \rho\phi\bar{u} \cdot \bar{n} dS = 0 \quad (3)$$

La velocità con cui una certa massa cambia all'interno di un volume di controllo è correlata solamente ai flussi convettivi di materia attraverso la superficie S . Applicando il teorema della divergenza, la forma differenziale della precedente assume la forma:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho\bar{u}) = 0 \quad (4)$$

4.2.2 Equazione di conservazione della quantità di moto.

L'equazione di conservazione della q.d.m è ricavata tenendo conto di tutte le forze che agiscono sul volume di controllo:

- forze di tipo superficiale: pressione, tensione superficiale, sforzi tangenziali;
- forze di campo: gravità, Coriolis, forze elettromagnetiche.

L'equazione scritta in termini integrali dice che la velocità con cui varia la q.d.m all'interno del volume di controllo è uguale alla somma delle forze di volume e di superficie agenti sul fluido:

$$\int \frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{u}) dV + \int \rho\bar{u}\bar{u} \cdot \bar{n} dS = \int \bar{\sigma} \cdot \bar{n} dS + \int \rho\bar{f} dV \quad (5)$$

in cui $\bar{\sigma}$ è il tensore degli sforzi.

Il termine sorgente per le forze di volume può essere scritto nella seguente forma: $\rho\bar{f} = \rho \sum_{i=1}^{N_c} f_k \omega_k$ con f_k è la forza agente sulla k -esima specie chimica e N_c è il numero totale di esse. Nel caso più diffuso in cui è presente solo la forza di gravità \bar{f} coincide con l'accelerazione g .

In forma differenziale la precedente si trasforma in:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\bar{u}) + \nabla(\rho\bar{u}\bar{u}) = \rho\bar{f} + \nabla\bar{\sigma} \quad (6)$$

4.2.3 Equazione di conservazione delle specie chimiche

Questa equazione è in pratica l'equazione di conservazione della massa verificata per ogni specie chimica presente all'interno del volume di controllo: sommando una ad una le equazioni scritte per ognuna delle specie chimiche presenti si ottiene proprio l'equazione di continuità.

$$\int \frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega_k) dV + \int \rho\bar{u}\omega_k \cdot \bar{n} dS = - \int \bar{J}_k \cdot \bar{n} dS + \int \dot{\Omega}_k dV \quad k = 1, \dots, N_c \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega_k) + \nabla(\rho\bar{u}c) = -\nabla\bar{J}_k + \dot{\Omega}_k \quad k = 1, \dots, N_c \quad (8)$$

dove:

ω_k frazione massiva della specie k-esima;

\bar{J}_k è il flusso diffusivo molecolare;

$\dot{\Omega}_k$ è la velocità di formazione della k-esima specie all'interno del volume di controllo;

Per queste ultime due grandezze valgono naturalmente le seguenti relazioni:

$$\sum_{k=1}^{N_c} \bar{J}_k = \bar{0};$$

$$\sum_{k=1}^{N_c} \dot{\Omega}_k = 0;$$

ad esempio nel caso in cui si abbia una reazione di combustione la velocità di formazione di un prodotto è direttamente correlata alla velocità di consumo dei reagenti e di conseguenza ciò influenza anche i relativi flussi diffusivi.

4.2.4 Equazione di conservazione dell'energia

La forma più generale viene scritta per l'energia totale specifica per unità di massa \hat{E} , data dalla somma dell'energia cinetica specifica \widehat{E}_k e dell'energia interna specifica \widehat{U} , associata quest'ultima alla temperatura, alla pressione e alla composizione del sistema. In formule:

$$\hat{E} = \widehat{E}_k + \widehat{U}(p, T, \omega_k) = \frac{1}{2}\bar{u}\bar{u} + \widehat{U}(p, T, \omega_k) \quad (9)$$

In forma integrale, l'equazione di conservazione dell'energia può essere scritta come:

$$\int \frac{\partial}{\partial t} (\rho \hat{E}) dV + \int \rho \hat{E} \bar{u} \cdot \bar{n} dS$$

$$= - \int \bar{q} \cdot \bar{n} dS + \int \bar{\sigma} \cdot \bar{u} \cdot \bar{n} dS + \int \dot{Q} dV + \int \rho \sum_{k=1}^{N_c} \omega_k \bar{f}_k \cdot (\bar{u} + \bar{v}_k) dV \quad (10)$$

in cui \dot{Q} è il termine sorgente di energia dovuto per esempio ad un flusso radiativo, \bar{q} è il flusso termico, mentre il quarto addendo a secondo membro è la potenza prodotta dalle forze di volume sulla specie k . L'equazione di conservazione dell'energia rispetta naturalmente il I principio della termodinamica: la variazione temporale dell'energia di una particella fluida è uguale alla somma del lavoro fatto su di essa e dalla velocità di scambio di calore.

4.3 Le leggi costitutive

Le equazioni di conservazione riportate in precedenza rappresentano un sistema di equazioni differenziali in grado di descrivere in ogni punto e in ogni istante l'evoluzione termo-fluidodinamica del sistema. Il numero di tali equazioni risulta tuttavia minore rispetto al numero di incognite del problema, rendendo il sistema indeterminato. Infatti, le incognite sono il vettore della velocità del fluido \bar{u} (tre componenti), la densità ρ , la pressione p , l'energia \hat{E} , le N_c frazioni massiche ω_k e le componenti del tensore degli sforzi $\bar{\sigma}$, il flusso diffusivo molecolare \bar{j}_k e il flusso di energia \bar{q} .

Le ultime tre incognite possono essere ricavate tramite apposite relazioni, dette leggi costitutive, che correlano le proprietà del fluido con le incognite principali rendendo possibile la chiusura del sistema. Oltre le leggi costitutive è poi necessaria un'equazione di stato in grado di determinare le variabili termodinamiche del fluido.

Con riferimento a fluidi Newtoniani, verranno di seguito riportate le leggi costitutive e la legge dei gas perfetti.

- *Legge di Newton*

La legge di Newton per la viscosità può essere utilizzata per ricavare il tensore degli sforzi:

$$\bar{\sigma} = 2\mu\bar{D} - \left(p + \frac{2}{3}\mu\nabla\bar{u}\bar{l}\right) = \left(2\mu\bar{D} - \frac{2}{3}\mu\nabla\bar{u}\bar{l}\right) - p\bar{l} = \bar{\tau} - p\bar{l} \quad (11)$$

con:

μ viscosità dinamica;

\bar{I} la matrice identità;

p pressione statica;

$\bar{\tau}$ è la parte viscosa del tensore degli sforzi;

\bar{D} tensore delle deformazioni le cui componenti sono calcolabili come:

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (12)$$

- *Legge di Fick*

I flussi diffusivi associati a ciascuna specie possono essere calcolati risolvendo il seguente sistema:

$$\nabla X_k = \sum_{p=1}^{N_c} \frac{X_k X_p}{\Gamma_{kp}} (V_p - V_k) + (\omega_k - X_k) \frac{\nabla p}{p} + \frac{\rho}{p} \sum_{p=1}^{N_c} \omega_k \omega_p (f_k - f_p) \quad k = 1, \dots, N_c \quad (13)$$

avendo indicato con V_p la velocità di diffusione della p -esima specie, con Γ_{kp} il coefficiente di diffusione binario massivo della specie k nella specie p e con X_k la sua frazione molare. Tale sistema è di tipo lineare di dimensione N_c^2 e va risolto per ogni istante, per ogni punto del dominio fluido.

Solitamente per diminuire l'onere computazionale, si usa al posto di tale sistema la legge costitutiva di *Fick* in base alla quale il flusso molecolare diffusivo viene calcolato considerando il coefficiente di diffusione della specie k nella miscela:

$$\omega_k V_k = -\Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k \quad \longrightarrow \quad \bar{J}_k = -\rho \Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k \quad (14)$$

- *Legge di Fourier*

Il flusso di energia è calcolabile attraverso la legge di Fourier; per completezza deve essere aggiunto un secondo addendo che tenga conto della diffusione di flussi entalpici associati a specie chimiche diverse:

$$\bar{q} = -\lambda_t \nabla T + \rho \sum_{k=1}^{N_c} H_k \omega_k \bar{V}_k \quad (15)$$

- *Equazione di stato*

Con l'equazione di stato si correla una grandezza di stato ad altre due, come avviene ad esempio nel caso in cui si esprima la pressione come funzione della densità e della temperatura della miscela:

$$p = p(\rho, T) \quad (16)$$

Nel caso in cui il comportamento della miscela di gas sia approssimabile a quello di un gas perfetto, la precedente equazione si modifica in:

$$p = \frac{\rho}{PM_k} T \quad (17)$$

4.4 Le equazioni di Navier-Stokes

Le equazioni di Navier-Stokes rappresentano un sistema di equazioni differenziali alle derivate parziali che nasce dall'”unione” delle leggi di conservazione con le leggi costitutive.

Equazione di continuità:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \bar{u}) = 0 \quad (18)$$

Equazione di conservazione della q.d.m.:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{u}) + \nabla(\rho \bar{u} \bar{u}) = \rho \bar{f} - \left(\nabla p + \frac{2}{3} \mu \nabla \bar{u} \right) + \nabla[\mu(\nabla \cdot \bar{u} + (\nabla \cdot \bar{u})^T)] \quad (19)$$

Equazione di conservazione delle specie:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega_k) + \nabla(\rho \bar{u} \omega_k) = \rho \frac{D \omega_k}{Dt} = \nabla(\rho \cdot \Gamma_{k,mix} \nabla \omega_k) + \dot{\Omega}_k \quad (20 =$$

Equazione di conservazione dell'energia:

$$\begin{aligned} \rho \frac{D \hat{E}}{Dt} = & -\nabla(\rho \bar{u}) + \nabla(\bar{\tau} \cdot \bar{u}) + \nabla \left(\lambda_t \nabla T - \rho \sum_{k=1}^{N_c} H_k \omega_k \bar{V}_k \right) + \dot{Q} \\ & + \rho \sum_{k=1}^{N_c} \omega_k \bar{f}_k \cdot (\bar{u} + \bar{V}_k) \quad (21) \end{aligned}$$

L'equazione dell'energia può essere esplicitata secondo l'entalpia totale specifica \widehat{H}_{tot} e l'entalpia specifica \widehat{H} :

$$\widehat{H}_{tot} = \hat{E} + \frac{p}{\rho} \quad (22)$$

$$\widehat{H} = \hat{U} + \frac{p}{\rho} \quad (23)$$

Introducendo le precedenti all'interno dell'equazione generale si ottengono le equazioni di conservazione dell'entalpia totale e specifica:

$$\rho \frac{D\widehat{H}_{tot}}{Dt} = \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \bar{q} + \nabla(\bar{\tau} \cdot \bar{u}) + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_c} \omega_k \bar{f}_k \cdot (\bar{u} + \bar{V}_k) \quad (24)$$

$$\rho \frac{D\widehat{H}}{Dt} = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \bar{q} + \bar{\tau} : \nabla \bar{u} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_c} \omega_k \bar{f}_k \cdot (\bar{u} + \bar{V}_k) \quad (25)$$

Il termine $\bar{\tau} : \nabla \bar{u}$ rappresenta il calore dissipato a causa della viscosità ed ha la peculiarità di essere sempre positivo:

$$Q_{diss} = \bar{\tau} : \nabla \bar{u} > 0 \quad (26)$$

Ulteriore complicazione per queste equazioni si ha nel caso in cui si tiene conto anche del calore associato alle reazioni chimiche; in questo caso si parla di entalpia sensibile, definita come:

$$\widehat{H}_s = \widehat{H} - \sum_{k=1}^{N_c} \Delta H_{f,k}^0 \cdot \omega_k \quad (27)$$

L'equazione per l'entalpia sensibile si ottiene a partire da quella dell'entalpia specifica:

$$\rho \frac{D\widehat{H}_s}{Dt} = \dot{Q}_R + \frac{Dp}{Dt} + \nabla(\lambda_t \nabla T) - \nabla \left(\rho \sum_{k=1}^{N_c} \Delta H_{s,k} \cdot \omega_k \bar{V}_k \right) + Q_{diss} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_c} \omega_k \bar{f}_k \cdot \bar{V}_k \quad (28)$$

con Q_R che è la potenza termica rilasciata dalle reazioni chimiche:

$$\dot{Q}_R = - \sum_{k=1}^{N_c} \Delta H_{f,k}^0 \Omega_k \quad (29)$$

Nel caso in cui le condizioni di efflusso sono lontane da quelle soniche, dall'equazione dell'entalpia sensibile si ricava un'equazione riferita alla temperatura, tenendo conto del legame tra loro esistente:

$$\rho \frac{D\widehat{H}_s}{Dt} = \sum_{k=1}^{N_c} \widehat{H}_{s,k} \rho \frac{D\omega_k}{Dt} + \rho c_p \frac{DT}{Dt} \quad (30)$$

↓

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \dot{Q}_R^* + \frac{Dp}{Dt} + \nabla(\lambda_t \nabla T) - \left(\rho \sum_{k=1}^{N_c} c_{p,k} \omega_k \bar{V}_k \right) \cdot \nabla T + Q_{diss} + \dot{Q} + \rho \sum_{k=1}^{N_c} \omega_k \bar{f}_k \cdot \bar{V}_k \quad (31)$$

avendo indicato con \dot{Q}_R^* il calore rilasciato da processi di combustione:

$$\dot{Q}_R^* = - \sum_{k=1}^{N_c} \Delta \widehat{H}_k \dot{\Omega}_k = - \sum_{k=1}^{N_c} \widehat{H}_{s,k} \dot{\Omega}_k - \sum_{k=1}^{N_c} \Delta \widehat{H}_{f,k}^0 \dot{\Omega}_k = - \sum_{k=1}^{N_c} \widehat{H}_{s,k} \dot{\Omega}_k + \dot{Q}_R \quad (32)$$

4.5 Le caratteristiche dei flussi turbolenti

I flussi turbolenti sono contraddistinti da diverse proprietà, tra le quali:

- non stazionarietà: i vettori velocità hanno un andamento randomico e caotico in funzione del tempo;
- tridimensionalità: per descrivere in modo completo i fenomeni che incorrono in un flusso turbolento devono essere prese in considerazione tutte e tre le componenti della velocità in ogni punto del dominio;
- elevato grado di vorticità: l'allungamento (stretching) delle strutture vorticose è un fattore di incremento dell'intensità di turbolenza;
- elevato grado di mescolamento: più l'intensità di turbolenza è elevata maggiore sarà il miscelamento tra le varie specie chimiche presenti nel flusso e, in generale, tutti i processi diffusivi incrementano la propria efficacia;
- le fluttuazioni si estendono su un range di tempi e di lunghezze caratteristiche estremamente ampi;

Un moto turbolento è formato da una serie di vortici di dimensione variabile tra loro interagenti: l'energia immessa nel sistema attraverso il funzionamento di una macchina viene trasferita da strutture vorticose grandi (della stessa scala caratteristica della macchina che fornisce energia) verso strutture più piccole in cui viene dissipata tramite la viscosità. Questo processo di trasferimento dell'energia dalle macroscale verso microscale è oggetto della teoria di *Kolmogorov* [4-5].

In ogni elemento fluido sono presenti vortici di diverse dimensioni che vanno dalla macroscale L alla scala dissipativa di *Kolmogorov* l_d : la macroscale è caratterizzata dalla massima dimensione delle strutture vorticose oltre la quale i vortici non sono più interagenti tra loro e, come appena detto, è dello stesso ordine di grandezza della dimensione caratteristica dell'apparato con cui è generato il moto turbolento.



Figura 4.1 Esempio di moto turbolento prodotto dal un aereo e macroscala dei vortici.

I macrovortici sono caratterizzati da bassa frequenza ed elevata lunghezza d'onda; l'energia ad essi associata viene trasferita verso le scale più piccole senza dissipazione di energia, almeno fino a quando il numero di Reynolds turbolento (definibile come $Re_\lambda = \lambda v_\lambda / \nu$) si mantiene elevato, ovvero fino a quando le forze inerziali sono preponderanti rispetto a quelle viscosi. Quando il trasferimento giunge verso scale per le quali $Re_\lambda \cong 1$ è il fenomeno di dissipazione a prevalere su quello inerziale e tutta l'energia trasferita viene dissipata: la microscala di *Kolmogorov* è proprio quella al disotto della quale l'energia non può essere più trasferita ma solo dissipata.

Come per qualsiasi altra tipologia di moto, anche un flusso turbolento risponde alle equazioni di Navier-Stokes. Tali equazioni contengono termini fortemente non lineari correlati agli sforzi inerziali ed è chiaro che essi assumano particolare importanza per flussi ad alto numero di Reynolds, ovvero proprio quando tali sforzi dominano su quelli viscosi ed il moto che sviluppa è turbolento. Nel caso di regime laminare, invece, le equazioni possono essere risolte in maniera abbastanza agevole nelle variabili istantanee anche per via numerica, definendo quindi in maniera completa tutto il campo di moto.

Al contrario, la non stazionarietà che caratterizza un moto turbolento, la caoticità e non determinabilità delle variabili che lo caratterizzano non permettono di ricavare soluzioni deterministiche per il campo di moto: non è quindi possibile definire il valore locale ed istantaneo di una grandezza. Tuttavia, attraverso considerazioni di tipo statistico è possibile ricavare informazioni molto utili per lo studio del moto: infatti, sebbene sia impossibile ricavare informazioni di tipo istantaneo sulle grandezze è invece possibile ottenere informazioni sui valori medi temporali sfruttando delle proprietà molto significative dei moti turbolenti. Tali medie devono essere eseguite su

intervalli di tempo abbastanza grandi rispetto al periodo che contraddistingue le fluttuazioni turbolente in modo da garantire la riproducibilità del moto.

Infatti, una grandezza fluttuante può essere strutturata in una serie di contributi funzione del tempo. Esiste uno di questi contributi a cui è associato un periodo caratteristico più grande di tutti gli altri e al quale tutti gli altri periodi sono correlabili. È proprio su questo valore del tempo caratteristico che devono essere eseguite le medie temporali delle varie grandezze: date condizioni iniziali stazionarie, i valori che si ottengono da questo processo di media si comportano mediamente in modo stazionario.

In conclusione, per ottenere informazioni che riguardino almeno i valori medi delle grandezze caratteristiche (velocità, pressione, temperatura, composizione chimica) occorre mediare le equazioni di Navier-Stokes.

4.6 *I modelli di turbolenza e i codici di calcolo CFD*

L'unico metodo utilizzato per risolvere flussi turbolenti è quello numerico attraverso l'uso di codici CFD (*Computational Fluid Dynamics*), soprattutto da quando la potenza di calcolo degli attuali dispositivi elettronici è diventata compatibile con l'elevato onere richiesto da questa tipologia di problemi. Nonostante sia impossibile ottenere soluzioni esatte del problema fluidodinamico, l'uso della CFD consente di studiare le varianti più disparate di uno stesso problema con costi e tempi di gran lunga inferiori rispetto alla pratica sperimentale, che talvolta può essere addirittura impraticabile; sono tra l'altro possibili analisi di sensitività rispetto a variazioni di condizioni operative o modifiche di geometria che in nessun altro caso possono essere studiate [4-5].

La soluzione fornita da tali codici non garantisce assoluta validità per tre principali motivi:

- prima di risolvere le equazioni differenziali, esse vengono trasformate in algebriche introducendo una semplificazione al fenomeno ma anche un'approssimazione;
- i fenomeni vengono descritti attraverso modelli che non possono essere perfettamente aderenti alla realtà (si pensi ai modelli di combustione);
- il volume di controllo su cui si applicano equazioni e modelli è oggetto di una discretizzazione, ovvero il fluido continuo viene trattato in maniera discreta.

Nei prossimi paragrafi verranno introdotti in maniera sintetica i più importanti approcci usati nelle fasi salienti dell'iter risolutivo adottato dai codici CFD.

4.6.1 Metodologie di discretizzazione

Si è già detto che il primo passo per la risoluzione numerica del problema fluidodinamico consiste nella discretizzazione del volume di controllo con la creazione della mesh di calcolo; quest'ultima è formata da un insieme di celle su ognuna delle quali vengono applicate in maniera iterativa le equazioni algebriche fino a giungere alla soluzione finale. Le celle possono assumere svariate geometrie a seconda del problema che deve essere studiato e della forma locale del volume. Il loro numero può essere variato dove necessario rendendo la mesh più o meno fitta, ciò in funzione dell'accuratezza richiesta e dei tempi di calcolo a disposizione: l'infittimento della griglia è comunque necessario nelle regioni in cui sono presenti elevati gradienti o dove sono intensi fenomeni di mescolamento [2-4].

Ciò che differenzia un metodo di risoluzione da un altro è la modalità con cui le equazioni vengono rese algebriche; i principali metodi sono:

- Metodo ai Volumi Finiti (*FVM: Finite Volume Method*);
- Metodo alle Differenze Finite (*FDM: Finite Difference Method*);
- Metodo agli Elementi Finiti (*FEM: Finite Element Method*).

Il metodo ai volumi finiti è, tra i tre, quello più utilizzato; visto che anche in *FLUENT* è adottato questo metodo, nel paragrafo che segue se ne fornisce una più approfondita descrizione.

Per quanto riguarda il metodo *FDM* le equazioni vengono risolte sui nodi delle celle di calcolo e sono approssimate tramite sviluppi in serie di Taylor o altre famiglie di funzioni polinomiali: più lo sviluppo viene troncato alle basse potenze più l'approssimazione risulta marcata.

Se l'*FDM* è il metodo meno utilizzato, più frequentemente viene adottato il codice *FEM* e, in particolare, quando il dominio di calcolo è di forma variabile oppure quando l'accuratezza richiesta differisce tra le diverse regioni del dominio. Il metodo lavora considerando ogni singolo elemento come un campo di integrazione dalle caratteristiche omogenee in cui la soluzione viene espressa dalla combinazione lineare

di funzioni base o funzioni di forma. Anche in questo caso l'accuratezza della soluzione dipende dal numero di funzioni utilizzate.

4.6.1.1 Metodo ai volumi finiti

Il metodo dei volumi finiti non risolve le equazioni differenziali ma lavora sulla loro forma integrale: suddiviso il volume di calcolo in una serie di piccoli volumi, le equazioni algebriche vengono risolte non sui nodi delle celle ma sui loro centroidi, andando a determinare il valore della generica variabile Φ al centro della stessa cella.

Prendiamo in considerazione la generica equazione di trasporto:

$$\int \frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) dV + \int \rho\phi\bar{u} \cdot \bar{n} dS = \int \bar{Q}_s(\phi) \cdot \bar{n} dS + \int Q_V(\phi) dV \quad (33)$$

Essa può essere applicata per ogni cella e, globalmente, su tutto il volume di controllo: difatti, sommando l'equazione per ogni cella non si ottiene nient'altro che l'equazione di conservazione globale della grandezza ϕ . La proprietà di conservazione globale è una delle caratteristiche più importanti di tale metodo.

Facendo un passo indietro, per rendere algebriche le equazioni devono essere utilizzate apposite funzioni di quadratura per la discretizzazione degli integrali di superficie e di volume.

Integrale di superficie: può essere calcolato come una sommatoria di integrali riferiti ad ognuna delle faccie del singolo volume:

$$\left(\int f dS \right)_S = \sum_k \left(\int f dS \right)_{S_k} \quad (34)$$

La complicazione nasce dal fatto che per calcolare questi integrali riferiti alle singole facce della cella bisognerebbe conoscere il valore assunto dalla funzione f su di esse; tale informazione non è nota visto che il valore di f è conosciuto solo al centro della cella. È quindi necessario calcolare questi integrali a partire da due approssimazioni:

- il valore della funzione integranda sulla faccia viene calcolato sulla base dei valori assunti nei centroidi delle celle adiacenti a quella in esame;
- tale valore, di solito associato al centro della faccia in esame, è l'unico di cui si dispone per il calcolo approssimato dell'integrale.

Noto quest'unico valore, l'integrale può essere calcolato, ad esempio, attraverso la "Regola del punto di mezzo", ovvero come prodotto tra l'area della superficie della faccia in esame ed il valore di f ad essa associato.

A questo punto occorre specificare come viene calcolato questo valore da associare alla faccia, sulla base, come appena detto, dei valori assunti da f nei centroidi delle celle adiacenti: anche in questi casi, la procedura più diffusa è quella dell'interpolazione polinomiale. I metodi più usati sono:

- *Interpolazione upwind*: è una soluzione di grado "0" che associa ad una faccia il valore di uno dei due centroidi delle celle aventi in comune la faccia stessa. Tra i due, il valore è scelto in base al verso della velocità locale. È un metodo molto semplice con un'approssimazione non molto accurata anche se è l'unico che, proprio per come è concepito, non soffre di oscillazioni durante il calcolo della soluzione;
- *Interpolazione lineare centrata*: è un metodo lineare che, prendendo in considerazione i due centroidi delle celle aventi in comune la faccia in esame, esegue una loro interpolazione lineare. È un procedimento risolutivo con errore di troncamento del secondo ordine che dipende dal quadrato del passo di griglia (sia che essa sia uniforme che variabile). Come ogni schema del secondo ordine o di ordine superiore si possono avere soluzioni oscillanti;
- *Interpolazione quadratica Upwind*: si aumenta ancora di uno il grado del polinomio con cui si interpolano i valori dei centroidi (si usa una parabola anziché una retta). In questo caso i due soliti centroidi utilizzati nei metodi esposti in precedenza non sono sufficienti e si deve ricorrere ad ulteriori punti della griglia. Più complesso del metodo ad interpolazione lineare centrata, tale schema porta ad errori di troncamento del terzo ordine, anche in questo caso sia con griglie a passo uniforme che variabile. Tuttavia, se tale metodo è usato insieme alla regola del punto di mezzo per il calcolo degli integrali di superficie, si ottiene un'approssimazione del secondo ordine, come nel caso precedente; in effetti le differenze tra i due metodi risultano essere molto piccole.

Integrale di volume: questo calcolo è molto più semplice del precedente dato che il valore in corrispondenza del centro della cella è già noto. L'integrale può quindi essere approssimato dal prodotto del valore della funzione integranda e il valore del volume della cella.

Una situazione più complessa riguarda le celle che si trovano sul contorno del volume di controllo. Infatti, mentre non esiste alcun problema per quel che riguarda il calcolo degli integrali di volume, la stima dei flussi attraverso le facce situate ai bordi richiedono una procedura particolare. Tali flussi o sono noti oppure devono essere calcolati in funzione delle sole variabili interne al dominio di calcolo (si parla di interpolazioni *one side*) visto che non esistono celle esterne al bordo.

4.7 Risoluzione del sistema di equazioni algebriche

La risoluzione del sistema di equazioni algebriche ottenute rappresenta il passo successivo per arrivare alla soluzione. Molto impegnativo dal punto di vista computazionale è il caso in cui si studi un fenomeno transitorio, visto che all'interno delle equazioni occorre tenere conto anche della variazione temporale delle grandezze; inoltre, deve essere introdotta una seconda discretizzazione, questa volta di tipo temporale, in modo da studiare l'intera evoluzione della storia del fenomeno. Più agevole è il caso dei fenomeni stazionari, visto che tutti i termini con derivata temporale si annullano dando vita ad un sistema di equazioni algebriche non lineari di più facile risoluzione.

Concentrandosi solo su quest'ultimi, visto che tutti i casi trattati all'interno della presente tesi riguardano fenomeni stazionari, due sono gli approcci possibili per ottenere la soluzione:

- risolvere le equazioni tutte contemporaneamente, in forma accoppiata;
- adottare il metodo di soluzione cosiddetto "*segregato*", in cui le equazioni vengono risolte una alla volta e in cui, all'interno di ogni equazione, compare una sola incognita mentre per le altre variabili si prende come valore quello dello step iterativo precedente.

Il secondo metodo è quello in assoluto più diffuso tra i software di CFD e consente di analizzare la convergenza della simulazione attraverso i residui che rappresentano la velocità di cambiamento della variabile step dopo step.

4.8 I diversi approcci per lo studio della turbolenza

Studiare numericamente un problema di tipo turbolento è tanto più oneroso quanto più alto è il numero di Reynolds visto che, incrementando tale parametro

adimensionale, aumenta il numero delle scale, spaziali e temporali, che devono essere modellate; ciò si riflette nella creazione di griglie di calcolo sempre più fitte e passi temporali più brevi. Volendo studiare il fenomeno in maniera completa occorre tenere presente che il rapporto tra la scala integrale e quella dissipativa è proporzionale a:

$$\frac{L}{l_d} = Re^{3/4} \quad (35)$$

Studiando fenomeni tridimensionali (come è quasi obbligatorio che sia visto che, come detto, la turbolenza è fenomeno tipicamente 3D) ciò comporta incrementare il precedente rapporto fino a $Re^{9/4}$; inoltre, per problemi non stazionari, è stato dimostrato che occorre adottare una discretizzazione temporale che sia proporzionale a Re^3 .

È evidente, quindi, che per alti numeri di Reynolds non è possibile studiare i problemi nella loro completezza ma è necessario introdurre degli approcci semplificati che consentano di diminuire il numero di celle della griglia di calcolo. Gli approcci più diffusi sono tre e di seguito se ne darà una breve descrizione [6].

- DNS (*Direct Numerical Simulation*)

Una simulazione numerica diretta prevede la risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes senza introdurre alcun modello di semplificazione per i flussi turbolenti, ragion per cui le discretizzazioni spaziali e temporali rispondono proprio ai rapporti riportati in precedenza. Tutte le scale della turbolenza vengono perciò risolte in modo esplicito, facendo ricorso a griglie di calcolo estremamente fitte. Per tale ragione la DNS viene usata solo nel caso di geometrie estremamente semplici e facendo uso di *cluster* estremamente performanti.

- LES (*Large Eddies Simulation*)

Attraverso questo approccio si provvede alla risoluzione delle sole scale turbolente più grandi, provvedendo a modellare quelle più piccole tramite regole di chiusura che agiscono come dei filtri in frequenza. Simulando flussi di reagenti si ottengono informazioni istantanee sulla posizione del fronte di fiamma alle scale più o meno prossime a quella integrale, mentre per tenere in considerazione gli effetti alle piccole scale è richiesto proprio un apposito modello.

- RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes*)

L'approccio RANS fornisce indicazioni solamente sui valori medi delle grandezze fluidodinamiche visto che le equazioni che vengono risolte sono proprio quelle di Navier-Stokes mediate. La non linearità delle equazioni comporta che, nel processo di mediazione, si aggiungano ulteriori termini incogniti riguardanti gli sforzi che rendono il problema non più chiuso; è possibile ottenere equazioni esatte per il calcolo di questi ulteriori termini ma al loro interno sono presenti altre incognite di ordine superiore il cui contributo alla soluzione non è trascurabile. Ciò induce a troncare questa gerarchia di equazioni (a fronte una perdita di informazioni) adottando un modello di chiusura grazie al quale le variabili incognite vengono calcolate in funzione di quelle mediate.

In definitiva, facendo un confronto tra i tre modelli (Figura 4.2), si può affermare che, mentre la DNS segue fedelmente le fluttuazioni turbolente, l'approccio RANS prende in considerazione solo il loro valore medio; da questo punto di vista la LES ha un comportamento intermedio visto che è in grado di seguire le fluttuazioni delle grandi scale ma deve modellare quelle delle piccole [7-8].

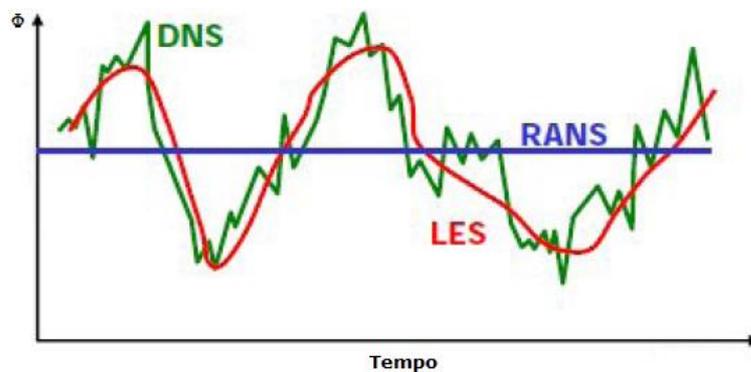


Figura 4.2 Differenze nell'approccio risolutivo per i metodi DNS, LES e RANS.

Tra i tre approcci il più utilizzato è quello RANS, soprattutto per i minori oneri computazionali richiesti; l'accuratezza dei risultati forniti dipende anche dal modello di chiusura turbolento scelto. Rispetto alla DNS, come detto utilizzata solo per lo studio di casi semplici e bassi numeri di Reynolds, la LES ha il vantaggio di adottare griglie più lasche ma occorre prestare attenzione al modello di subgrid da cui dipendono la qualità del calcolo e l'accuratezza dei risultati.

4.8.1 Approccio RANS

Detta $\phi(x_i, t)$ la grandezza di interesse, il suo valore mediato può essere calcolato come:

$$\bar{\phi}(x_i, t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \phi^k(x_i, t) \quad (36)$$

dove N è il numero dei campionamenti effettuati. In pratica, esso rappresenta la media temporale prendendo come intervallo un tempo sufficientemente più grande rispetto alla scala temporale associata ai moti turbolenti:

$$\bar{\phi}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi(x_i, t) dt \quad (37)$$

Naturalmente, il valore istantaneo è dato dalla somma del valore medio e della fluttuazione (scomposizione di Reynolds):

$$\phi(x_i, t) = \bar{\phi}(x_i, t) + \phi'(x_i, t) \quad (38)$$

Per quanto riguarda le proprietà matematiche dell'operatore media, si può affermare che la media delle fluttuazioni è per definizione nulla:

$$\overline{\phi'}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi'(x_i, t) dt = 0 \quad (39)$$

mentre la media del prodotto di due fluttuazioni è diversa da zero:

$$\overline{\phi' \psi'}(x_i, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi'(x_i, t) \psi'(x_i, t) dt \neq 0 \quad (40)$$

Data tale premessa, si introduce ora la scomposizione alla Reynolds all'interno delle equazioni di conservazione:

Equazione di conservazione della massa:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0$$

Inserendo la scomposizione di Reynolds ed eseguendo l'operazione di media (indicata con il simbolo $\langle \rangle$) si ha:

$$\left\langle \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i'}{\partial x_i} \right\rangle = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (41)$$

Considerando i valori medi, l'equazione di continuità è formalmente identica per il campo di moto istantaneo e per quello mediato.

Equazione di conservazione della q.d.m.:

Trascurando le forze di campo ed applicando l'operatore di media componente per componente dopo aver introdotto la scomposizione di Reynolds, si ottiene:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (42)$$

$$\begin{aligned} < \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial u'_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j + u'_i \bar{u}_j + \bar{u}_i u'_j + u'_i u'_j) \\ &= -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial p'}{\partial x_i} \right) + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i + u'_i) \right) > \quad (43) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{u}_i \bar{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u'_i u'_j}) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (44)$$

In questo caso esiste una differenza tra l'equazione del moto istantaneo e quella per il moto "mediato" vista la presenza del termine: $\frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u'_i u'_j})$. Questo addendo rappresenta uno scambio di quantità di moto connesso alle fluttuazioni turbolente e, accarpendolo nel termine viscoso:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u'_i u'_j} \right) \quad (45)$$

può essere interpretato come uno sforzo relativo al trasporto di quantità di moto turbolento (detto sforzo di Reynolds) che si va ad aggiungere allo sforzo viscoso; nei flussi turbolenti gli sforzi di Reynolds risultano essere preponderanti rispetto a quelli viscosi. La modellizzazione di questo termine si rende necessaria visto che il problema, con l'aggiunta di questa ulteriore incognita, risulta non chiuso.

Per farlo si può procedere in analogia con il fenomeno dello scambio di quantità di moto tra diversi strati di fluido per mezzo del movimento molecolare: si consideri un profilo di velocità bidimensionale diretto nel verso delle x positive e con un gradiente rispetto alla direzione perpendicolare positivo $\frac{\partial u}{\partial y} > 0$. Considerando due strati di fluido con diverse velocità medie, una particella fluida con componente fluttuante v' positiva è trasportata verso l'alto; provenendo da uno strato in cui la componente \bar{u} è minore è maggiormente probabile che si muova in direzione x più lentamente del fluido che la circonda, ovvero che abbia una componente fluttuante u' negativa: ciò spiega il motivo per il quale gli sforzi di Reynolds siano sempre positivi. L'analogia con la generazione

di sforzi tangenziali dovuti al moto molecolare (e quindi legati in qualche modo alla viscosità del fluido) ha portato all'introduzione del concetto di viscosità turbolenta μ_T :

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_T \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (46)$$

Si deve precisare che, mentre la viscosità μ è una proprietà intrinseca del fluido, quella turbolenta μ_T è connessa solamente al regime di moto turbolento ed è, di conseguenza, una proprietà della corrente che varia da punto a punto del campo fluidodinamico. A questo punto il problema si è spostato sul calcolo della viscosità turbolenta: per avere la chiusura del sistema di equazioni questa grandezza può essere calcolata secondo diverse relazioni di diverso ordine. Quella più utilizzata è la chiusura al secondo ordine che dà vita al modello $k - \varepsilon$, in base alla quale la viscosità turbolenta è calcolata come:

$$\mu_T = C_\mu \frac{K}{\varepsilon} \quad (47)$$

con C_μ costante di calibrazione sperimentale che si unisce ad altre costanti contenute nelle equazioni per l'energia cinetica turbolenta K e per la velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta ε . Il passo successivo è proprio quello di ricavare le equazioni per K e per ε , quest'ultima di natura sperimentale.

Equazione di conservazione dell'energia:

L'equazione per l'energia cinetica turbolenta del moto fluttuante si può ricavare seguendo la seguente procedura. Innanzitutto, per ogni componente cartesiana della velocità, si ottiene un'equazione differenziale per la componente fluttuante sottraendo l'equazione di conservazione della q.d.m del moto medio a quella del campo istantaneo:

$$\frac{\partial u'_i}{\partial t} + (\bar{u}_j + u'_j) \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} + u'_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \overline{u'_j \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p'}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \quad (48)$$

Moltiplicando la precedente per u'_i ed eseguendo la media si ha:

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{\partial \overline{u_i'^2}}{\partial t} + \frac{1}{2} \bar{u}_j \frac{\partial \overline{u_i'^2}}{\partial x_j} = -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u'_i u'_i u'_j}) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{p' u'_i}) + \nu u'_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \right) \right\rangle \quad (49)$$

Se si ripete quanto fatto per tutte e tre le componenti cartesiane della velocità e si sommano le equazioni così ottenute si ottiene:

$$\frac{\partial \bar{k}'}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{k}'}{\partial x_j} = -\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\nu \frac{\partial \bar{k}'}{\partial x_j} + \frac{1}{2} (\overline{u'_i u'_i u'_j}) - \frac{1}{\rho} \overline{p' u'_j} \right) - \nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \quad (50)$$

Anche in questo caso i termini fluttuanti che compaiono al secondo membro devono essere modellati in funzione delle grandezze relative al campo medio, altrimenti si introducono ulteriori incognite; è da queste nuove modellizzazioni che vengono introdotte le altre costanti sperimentali cui si faceva riferimento in precedenza.

Da un punto di vista fisico, la precedente dice che il trasporto convettivo dell'energia cinetica è pari alla somma di:

- un termine di produzione dell'energia cinetica dovuto alla presenza di gradienti di velocità nel campo medio;
- un termine di diffusione che dipende sia dalla viscosità che dai fenomeni di trasporto turbolento;
- un termine di dissipazione correlato alla viscosità che agisce solamente alle piccole scale.

$$\frac{D\bar{k}'}{Dt} = P + D + \varepsilon \quad (51)$$

Equazione analoga si ottiene per l'energia cinetica del campo medio in cui il termine di produzione $\overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$ è presente con il segno opposto: ciò significa che l'energia cinetica prodotta nel campo medio (segno positivo) si trasferisce verso quello fluttuante (segno negativo) dove viene appunto trasformata in calore ad opera del termine di dissipazione viscosa $-\nu \frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}$.

Quanto finora detto è riferito al modello $k - \varepsilon$; esistono tuttavia molte varianti a questo modello, la prima delle quali è il $k - \varepsilon$ *RNG* (ReNormalization Group): a differenza del precedente, questo modello introduce termini modificati nelle equazioni per k ed ε e differenti valori per le costanti. Presenta un comportamento migliore nello studio di fluidi soggetti a rapide deformazioni e a bassi numeri di Reynolds.

Altro modello derivante dal $k - \varepsilon$ è quello denominato $k - \varepsilon$ *Realizable* che utilizza una diversa equazione per ε e una diversa formulazione per la viscosità turbolenta; consente di descrivere in maniera adeguata flussi con ricircolazioni e separazioni.

Di diversa natura è la chiusura $k - \omega$, con ω la velocità di dissipazione dell'energia turbolenta specifica; pensato soprattutto per fenomeni a basso numero di Reynolds, è in grado di descrivere adeguatamente i fenomeni a parete, soprattutto nella variante $k - \omega$ *SST* (*Shear - Stress Transport*).

4.8.2 *Approccio LES*

Per tentare di ridurre le risorse di calcolo necessarie a risolvere i flussi turbolenti, è stato sviluppato un approccio semplificato rispetto al DNS, il LES (Large Eddy Simulation). In questo metodo si applica un filtro spaziale alle equazioni di conservazione, in modo da simulare soltanto i vortici di più grandi dimensioni, mentre quelli più piccoli vengono modellati nelle equazioni.

L'idea su cui si basa l'approccio LES è che le strutture più grandi siano le maggiori responsabili del trasporto delle grandezze, e che siano anche le più direttamente influenzate dalle condizioni al contorno. D'altro canto, le piccole strutture sono meno efficaci nel trasporto delle grandezze, e sono quasi uniformemente distribuite nel flusso; ciò rende relativamente semplice una loro modellazione. In pratica si risolvono direttamente solo le grandi scale della turbolenza, cioè quelle più grandi della discretizzazione usata.

I vantaggi di questo approccio sono i seguenti:

- il moto delle grandi scale, responsabili del trasporto della maggior parte dell'energia e quantità di moto, viene direttamente simulato;
- si deve modellizzare solo l'effetto delle più piccole scale della turbolenza, per cui è più facile trovare modelli di validità generale;
- si può scegliere il livello di dettaglio delle informazioni che si ottengono dalla simulazione scegliendo la dimensione del filtro (discretizzazione);
- la tridimensionalità e non stazionarietà del flusso vengono automaticamente prese in considerazione.

Invece gli svantaggi sono principalmente dovuti al costo computazionale molto più elevato rispetto ai metodi RANS, poiché le simulazioni devono essere sempre 3-D e non stazionarie. Nonostante ciò, la richiesta di risorse di calcolo diminuisce notevolmente rispetto alla simulazione DNS, per cui l'applicazione delle simulazioni Large Eddy a problemi di interesse pratico sembra possibile, viste le attuali prestazioni dei calcolatori. Una prima stima della diminuzione delle richieste computazionali può essere fatta utilizzando la seguente correlazione:

$$N_{LES} \approx \left(\frac{0.4}{Re_t^{0.25}} \right) N_{DNS} \quad (52)$$

La separazione tra le grandi e le piccole scale di grandezza si ottiene tramite un'operazione di filtraggio, che permette di conservare solamente le componenti delle grandezze dovute alle grandi scale; le equazioni del moto vengono filtrate nello spazio sui sottodomini: C_1, \dots, C_N , con:

$$\bigcup_{i=1, \dots, N} C_i = \Omega \quad (53)$$

che è il dominio “globale”; se si desidera filtrare la generica funzione $f(X', t)$, si può scrivere:

$$f(X', t) = \int_{C_i} f(X', t) G(X - X') dX' \quad (54)$$

dove $G(X - X')$ è una funzione filtro normalizzata, cioè:

$$\int_{C_i} G(X - X') dX' = 1 \quad (55)$$

In 3-D una funzione filtro può essere scritta come segue:

$$G(X - X') = \prod_{i=1}^3 G_i(x_i - x_i') \quad (56)$$

dove $G_i(x_i - x_i')$ è un filtro nella direzione di x_i ; quest'ultimo è detto kernel (o “nucleo”) del filtro, a cui è associata una dimensione caratteristica Δ_i , che separa le grandi strutture dalle piccole. Nei modelli LES, uno dei filtri (nello spazio fisico) più comunemente usati è quello Gaussiano, definito come segue:

$$G_i(x_i - x_i', \Delta_i) = \left(\frac{6}{\pi \Delta_i^2} \right)^{0,5} \exp \left(-6 \frac{|x_i - x_i'|^2}{\Delta_i^2} \right) \quad (57)$$

un'altra possibilità è il filtro “box”, o “top-hat”:

$$G_i(x_i - x_i', \Delta_i) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_i} & \text{dove } |x_i - x_i'| \leq \frac{\Delta_i}{2}, \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (58)$$

Quello appena descritto è uno dei filtri più semplici, ed applicarlo equivale ad applicare una media spaziale su un cubo di lato Δx_i . La sua implementazione numerica è sensibilmente semplificata, se Δx_i è uguale alla dimensione della discretizzazione spaziale applicata. In questo caso l'operazione di filtraggio è implicitamente svolta, integrando, sul volume di controllo, le equazioni di conservazione mediate.

Esistono anche i filtri nello spazio dei numeri d'onda, come, ad esempio, il filtro sharp-cutoff:

$$\hat{G}_i(k) = \begin{cases} 1 & \text{dove } -\frac{\pi}{\Delta_i} \leq k \leq \frac{\pi}{\Delta_i}, \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (59)$$

Spesso si utilizzano questi tipi di filtro, perché i filtri nello spazio fisico (se si esclude il filtro passa-basso), sottraggono energia anche alle scale risolte, quindi, anch'essi “dissipano energia”.

Quindi, applicando un filtro alle equazioni di Navier-Stokes e, sfruttando le proprietà dei filtri, (in particolare la commutazione con gli operatori differenziali), si ottengono le seguenti equazioni filtrate:

Equazione di continuità:

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (60)$$

Equazione di bilancio della quantità di moto:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{u}_i) + \frac{\partial (\bar{u}_i \bar{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} (2\nu \bar{E}_{ij} - \tau_{ij}) \quad (61)$$

dove:

$$\bar{E}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad e \quad \tau_{ij} = (\bar{u}_i \bar{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_i) \quad (62)$$

Quest'ultimo è il tensore degli sforzi di sottogriglia (SubGrid-Scale stress tensor, o SGS stress tensor), che ha le dimensioni di una velocità al quadrato. A volte è indicato con il simbolo τ_{ij}^{SGS} , che è il termine che deve essere modellizzato per chiudere le equazioni della LES.

4.8.2.1 Modello di Smagorinsky (1963)

Il tensore degli sforzi di sottogriglia, o tensore di subgrid, viene modellizzato con l'aggiunta di una viscosità di subgrid:

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \tau_{kk} = -2C\bar{\Delta}^2 |\bar{E}| \bar{E}_{ij} \quad (63)$$

in cui:

$$|\bar{E}| = (\bar{E}_{ij} \bar{E}_{ij})^{0.5} \quad (64)$$

Quindi \bar{E}_{ij} è la parte filtrata della componente “i-j” del tensore velocità di deformazione.

Si osserva che τ_{ij} ha la stessa forma dei termini viscosi, perciò si può porre $\nu_s = 2C\bar{\Delta}^2|\bar{E}|$, cioè ν_s può essere considerata una viscosità di subgrid (“Eddy-Viscosity”), quindi si può scrivere:

$$\tau_{ij} - \frac{\delta_{ij}}{3}\tau_{kk} = -\nu_s\bar{E}_{ij} \quad (65)$$

I principali problemi relativi al Modello di Smagorinsky sono elencati di seguito:

- la costante C deve essere assegnata a priori (dipende dal tipo di flusso),
- difficoltà nel tenere conto dell’anisotropia della turbolenza dei piccoli vortici in prossimità delle pareti, per cui il metodo predice un comportamento asintotico sbagliato vicino alle pareti, o in un flusso laminare: infatti τ_{ij} non va a zero,
- non permette il passaggio di energia dalle piccole scale alle grandi scale risolte (“backscatter”); infatti $\varepsilon = \tau_{ij}\bar{E}_{ij} < 0$ in ogni caso, cioè si ha solo dissipazione di energia,
- si fa l’ipotesi che gli assi principali di τ_{ij} siano paralleli a quelli del tensore di velocità di deformazione \bar{E}_{ij} .

4.9 La combustione turbolenta

I processi chimici e fisici che sono alla base della combustione turbolenta sono molto complessi e tra loro interconnessi. Come noto l’ossidazione degli idrocarburi avviene mediante reazioni chimiche elementari a catena (in cui sono coinvolte anche specie radicaliche) la cui velocità è controllata essenzialmente dalla temperatura e dalla concentrazione di reagenti e prodotti (legge di *Arrhenius*). Tuttavia quando il campo di moto in cui avviene il processo di combustione è turbolento la velocità con cui tali reazioni hanno luogo viene fortemente influenzata dalle fluttuazioni locali delle proprietà del campo di moto (tipiche della turbolenza). Una accurata modellazione della combustione turbolenta deve, pertanto, tener conto della forte interazione tra il flusso turbolento e le velocità di combustione. Alla base di un qualunque modello di combustione è la formulazione delle equazioni di bilancio per l’energia e per le specie chimiche. Se consideriamo una miscela di n specie chimiche l’equazione di trasporto della frazione massica Y_i della specie i -esima si esprime:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega_k) + \nabla \cdot (\rho\bar{u}\omega_k) = \rho \frac{D\omega_k}{Dt} = -\nabla \cdot \overline{J_k} + \dot{\Omega}_k \quad (66)$$

Nella modellazione di flussi reagenti in regime turbolento assume, dunque, un ruolo di primaria importanza il modo in cui la velocità (media) di produzione o scomparsa della specie i -esima viene valutata.

4.10 Combustione non premiscelata

Nelle combustione non premiscelata turbolenta, nota anche come combustione diffusiva, combustibile ed ossidante entrano nella zona di reazione separatamente. Pertanto, il processo di mescolamento (dominato dalla diffusione turbolenta dei reagenti) regola la velocità con cui avvengono le reazioni di ossidazione. Questo è strettamente vero quando le scale temporali della turbolenza, responsabile del mixing, sono più grandi di quelle associate ai processi chimici; in tal caso appare dunque appropriata l'ipotesi di chimica veloce (ovvero di equilibrio chimico locale). Questa ipotesi consente di effettuare una importante semplificazione nella modellazione della combustione non premiscelata in quanto permette di ricondurre la complessa chimica della combustione ad un solo parametro: la *frazione di miscelamento* (in inglese *mixture fraction*) f . Tutti i parametri di interesse, quali temperatura, concentrazioni e densità, possono poi essere correlati alla frazione di miscelamento.

La potenza dell'approccio della frazione di miscelamento consiste nel ridurre, come detto, la chimica ad una sola quantità conservativa (la mixture fraction per l'appunto). Tutte le quantità termo-chimiche (frazioni di massa delle varie specie, densità, temperatura), fissata una descrizione della chimica del sistema reattivo, possono essere calcolate come funzione della f . Il dettaglio della relazione funzionale tra la generica proprietà e la f dipende dal tipo di descrizione della chimica del sistema. Una possibilità è rappresentata dal modello di *Burke-Shumann* in cui la chimica è considerata infinitamente veloce ed irreversibile ipotizzando che combustibile e ossidante non possano coesistere nello spazio e che la conversione possa riferirsi ad una reazione *one step* da reagenti a prodotti che avvenga praticamente in condizioni stechiometriche (modello che potremmo definire *Mixed-is-Burned*). Tale tipo di descrizione consente di determinare le frazioni massiche delle specie direttamente da una data reazione stechiometrica senza richiedere informazioni sull'effettivo

meccanismo cinetico o sull'equilibrio chimico. Il limite principale di questo approccio è l'impossibilità di predire la formazione di specie intermedie e di considerare gli effetti di dissociazione. Ciò porta ad una sovrastima dei picchi di temperatura, specialmente in sistemi caratterizzati da temperature massime molto elevate. Un altro modello si basa sull'ipotesi che le reazioni chimiche siano sufficientemente rapide da raggiungere l'equilibrio chimico a livello molecolare. Una miscela reagente di gas ideali è caratterizzata da un unico stato di equilibrio chimico, in cui tutte le reazioni elementari sono a loro volta in equilibrio. La composizione dei prodotti finali di equilibrio, in funzione di f , può essere calcolata mediante procedure basate sulla minimizzazione dell'energia libera di Gibbs o su formulazioni basate sulle costanti di equilibrio. Con tale approccio è possibile prevedere le specie intermedie senza richiedere la conoscenza dettagliata dei meccanismi cinetici. Fino a quando la velocità di reazione può essere considerata più elevata di quella di diffusione delle specie attraverso la fiamma, l'ipotesi di equilibrio chimico locale può essere ritenuta valida. Tuttavia quando la turbolenza deforma e stira la fiamma, i gradienti di temperatura e di specie aumentano consentendo alle specie chimiche, in maggioranza radicali, di "uscire" più rapidamente dalla zona di reazione. In questo modo, avendo le specie meno tempo a disposizione per raggiungere l'equilibrio, il sistema si allontana più rapidamente da questo.

Quando si ha a che fare con sistemi lontani dall'equilibrio, l'ipotesi di equilibrio chimico locale può condurre a risultati non realistici. Per tener conto degli effetti di un moderato non equilibrio è stato sviluppato il modello delle *flamelet*. In sostanza questo approccio vede le fiamme turbolente come un insieme di sottili, laminari, localmente monodimensionali piccole fiamme (le *flamelet*) immerse nel campo turbolento. La *flamelet* elementare comunemente utilizzata è rappresentata da una fiamma laminare a contro diffusione costituita da due getti contrapposti, rispettivamente di combustibile ed ossidante, assial simmetrici. Se si riduce la distanza tra i getti o si aumenta la velocità degli stessi, la fiamma viene deformata, e si allontana sempre più dall'equilibrio fino, eventualmente, a spegnersi. Le frazioni massiche delle specie chimiche coinvolte possono essere misurate mediante esperimenti o, più comunemente, calcolate. In quest'ultimo caso le equazioni che governano il fenomeno (trasporto delle frazioni massiche ed equazione dell'energia) vengono riformulate nello spazio della frazione di miscelamento. In questo modo tutte le proprietà del sistema possono essere descritte da

due soli parametri: la mixture fraction e la *dissipazione scalare* χ . La complessa cinetica chimica può, pertanto, essere preprocessata consentendo una drammatica riduzione dei tempi di calcolo.

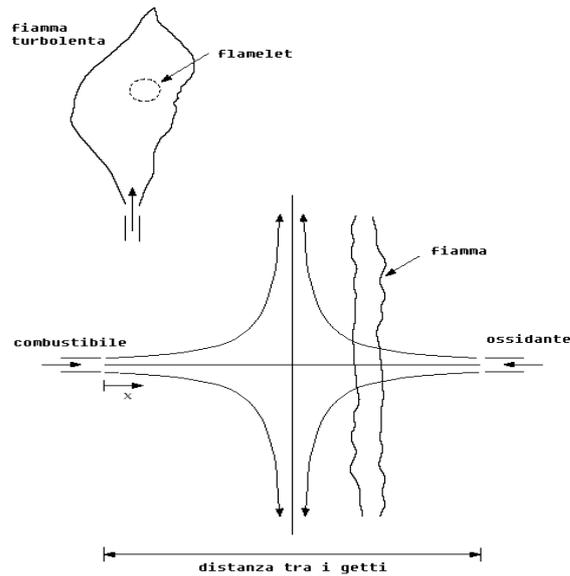


Figura 4.3 Schematizzazione del modello delle flamelet.

4.11 Turbolenza e combustione non premiscelata

Nell'approccio alla combustione diffusiva basato sulla frazione di miscelamento si tiene conto dell'interazione con la turbolenza mediante la cosiddetta *Probability Density Function, PDF*. Questa, che di seguito indicheremo con $p(f)$, può essere interpretata come la frazione di tempo che una particella fluida trascorre nelle condizioni individuate da un certo valore della mixture fraction.

La forma reale della funzione densità di probabilità dipende intrinsecamente dalla natura delle fluttuazioni turbolente di f . La $p(f)$, dunque, non è altro che una funzione matematica con la quale si tenta di approssimare l'andamento della PDF osservata sperimentalmente.

La scelta della forma matematica della $p(f)$ si fonda su misure sperimentali delle fluttuazioni di concentrazione delle specie chimiche.

Il modello di combustione non premiscelato consente, pertanto, di preprocessare tutte le grandezze coinvolte nelle reazioni chimiche costruendo una *tabella (look up table)* funzione del valor medio e della varianza della frazione di miscelamento. Il solutore fluidodinamico si vede così ridurre drasticamente gli oneri computazionali

legati alla chimica dettagliata. Infatti questo dovrà risolvere soltanto due equazioni aggiuntive desumendo dalla tabella i valori di tutte le proprietà coinvolte (concentrazioni delle specie, densità, temperatura, ecc.).

4.12 La generazione delle flamelet

Quando si deve studiare la combustione di combustibili liquidi o in generale di fiamme non premiscelate, il modello più adatto allo scopo è quello *Laminar Flamelets*, visto che permette di descrivere tutte le fasi del fenomeno, dall'evaporazione alla successiva ossidazione.

La fiamma turbolenta viene modellizzata attraverso una serie di fiamme laminari stazionarie a contro diffusione che possono essere descritte in funzione della mixture fraction lungo la direzione normale all'asse della fiamma. In particolare, la zona di reazione si colloca nella regione in cui i componenti raggiungono i valori stechiometrici. Utilizzando tale approccio si possono studiare e tenere in conto fenomeni di allontanamento dall'equilibrio e i fenomeni di estinzione dovuti alle deformazioni (strain) ad opera della turbolenza.

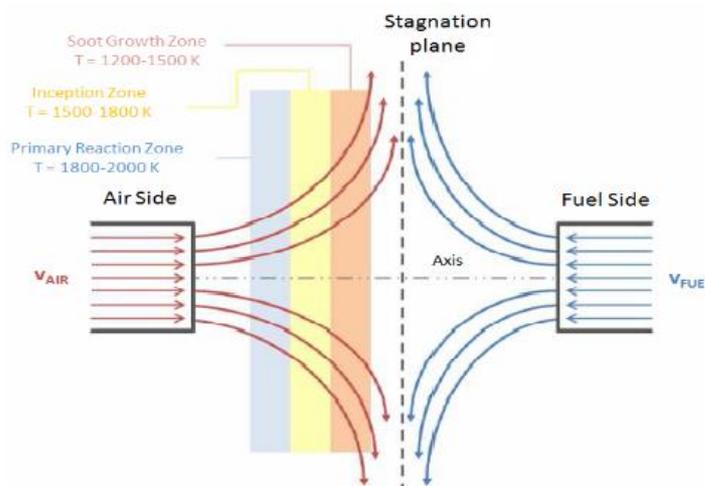


Figura 4.4 Modello di flamelet a contro diffusione.

La costruzione delle librerie di flamelet può essere effettuata sia mediante misure sperimentali sia, più comunemente, risolvendo un set di equazioni monodimensionali per le fiamme laminari diffusive a getti contrapposti. Le equazioni che governano l'evoluzione di questo tipo di fiamme possono essere trasformate dallo spazio fisico nello spazio della frazione di miscelamento f . Oltre la mixture fraction, la

seconda grandezza attraverso la quale si descrive il fenomeno è lo *Scalar Dissipation Rate* χ , che può essere visto come un'espressione della velocità di miscelazione ed interpretato come l'inverso del tempo caratteristico di diffusione; quando χ è elevato si ha una diffusione molto veloce e ciò comporta avere un gradiente di f e un profilo di temperatura ripidi con una zona di reazione molto ristretta. Per valori estremi di χ si ha l'estinzione della flamellet visto che il gradiente diffusivo di calore supera il rilascio di calore nella fiamma.

Nelle zone in cui il rapporto di miscela raggiunge il valore stechiometrico, individuate dal valore f_{stec} , si tiene conto della velocità di reazione modellizzando la zona reattiva come un piccolo strato di gas avente spessore minore della scala di Kolmogorov; allontanandosi da tale zona si perde questa necessità essendo le velocità di reazione molto più basse o nulle.

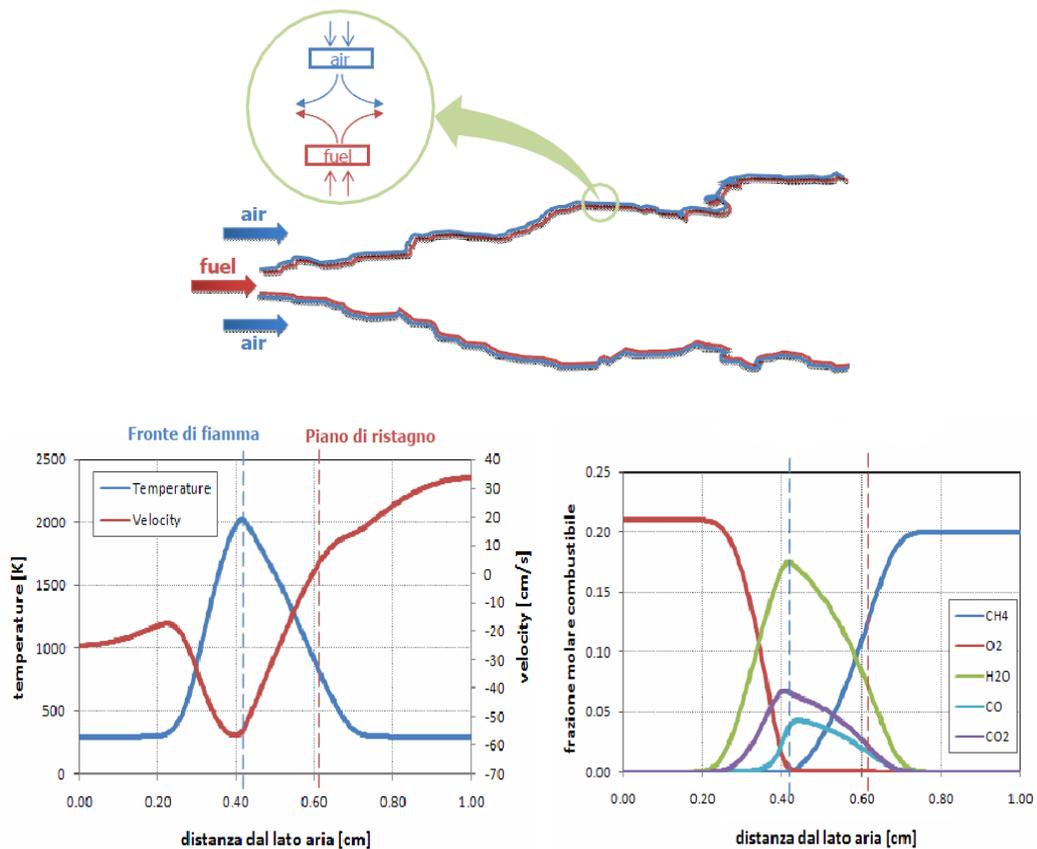


Figura 4.5 Andamento delle principali grandezze in funzione della distanza “lato aria”.

Per quanto riguarda un combustibile liquido, quanto descritto può essere visto come schematizzazione di ciò che accade in prossimità della superficie delle gocce

all'interno del fronte di fiamma: il fenomeno diffusivo vedrà coinvolti l'aria comburente che circonda la goccia stessa e il vapore di combustibile derivante dalla sua evaporazione. In questo caso, prima di procedere con l'applicazione del modello per la combustione bisogna studiarne l'evaporazione; tale studio avviene sempre tramite appositi modelli che, per brevità di trattazione, non verranno riportati.

Bibliografia

- [1] C.M. Casciola, Dispense del corso di Combustione e Turbolenza.
- [2] Versteeg H.K., Malalasekera W.; An introduction to computational fluid dynamics. The finite volume method; Publisher: Pearson Education limited, England; 2007;
- [3] Chiodi M., “An Innovative 3D-CFD-Approach towards Virtual Development of Internal Combustion Engines”, Springer, 2011.
- [4] Wendt J. F., “Computational Fluid Dynamics”, Springer, 2009.
- [5] Shi Y., Hai-Wen Ge, Reitz R. D., “Computational Optimization of Internal Combustion Engines”, Springer, 2011.
- [6] Computational Fluid Dynamics 2004 “Proceedings of the Third International Conference on Computational Fluid Dynamics”, ICCFD3, Toronto, 2004.
- [7] B. E. Launder and D. B. Spalding. “Lectures in Mathematical Models of Turbulence”. Academic Press, London, England, 1972.
- [8] D. C. Wilcox. “Turbulence Modeling for CFD”. DCW Industries, Inc., La Canada, California, 1998.

5 Simulazioni spray

5.1 Introduzione

Lo studio dell'iniezione per la formazione dello spray nei motori diesel è senza dubbio utile per la comprensione dei meccanismi che portano alla riduzione delle emissioni di inquinanti durante il processo di combustione [1]. In questo capitolo l'attenzione sarà rivolta all'influenza della cavitazione sulla morfologia dello spray. L'analisi sarà realizzata attraverso simulazioni CFD con il software *Fluent* che hanno riguardato sia gasolio che biodiesel, proprio per mettere in evidenza l'impatto delle diverse caratteristiche chimico-fisiche sul fenomeno. In particolare, si è analizzato un tipico iniettore per motori diesel in un ampio campo di pressioni di iniezione.

In prima battuta è stato simulato il flusso all'interno del *nozzle* dell'iniettore, tema affrontato da molti ricercatori [2-4], in modo da studiare lo sviluppo della cavitazione all'interno dell'orifizio, mostrando quella che è l'influenza delle diverse proprietà fisiche dei combustibili considerati [5-7]. In secondo luogo, i risultati di tali simulazioni sono stati sfruttati per l'effettiva simulazione dello spray: le caratteristiche del flusso nella sezione di uscita dell'iniettore sono state mediate ed usate come input per la seconda serie di simulazioni.

I casi simulati assicurano quindi una completa descrizione della fase di iniezione, fondamentale per avere un corretto approccio alla successiva fase di combustione. In particolare il fenomeno della cavitazione ha evidenziato importanti riflessi sulle caratteristiche dello spray come la portata in massa, la turbolenza, la velocità del flusso all'interno dell'iniettore e la morfologia dello spray (penetrazione assiale e angolo di apertura, diametro medio di Sauter, etc).

L'approccio impiegato è stato validato tramite la comparazione dei dati numerici con risultati sperimentali relativi alla morfologia dello spray. In particolare è stata evidenziata un'eccellente corrispondenza dei parametri considerati come la penetrazione assiale dello spray (tip penetration), l'angolo di apertura dello spray ed il diametro medio di Sauter. I risultati delle simulazioni hanno mostrato come le proprietà fisiche del biodiesel riducono il fenomeno della cavitazione e l'energia cinetica turbolenta nella sezione di uscita dell'iniettore e ciò porta ad un ritardo del break-up

dello spray ed una conseguente maggiore penetrazione assiale. Viceversa, per il gasolio, la sua minore tensione superficiale e viscosità così come l'insorgere della cavitazione portano ad una maggiore atomizzazione evidenziata dai valori inferiori del diametro medio di Sauter.

Anche altri autori si sono occupati di tali argomenti negli ultimi anni, confermando i risultati ottenuti. In particolare, Wang [8] ha confrontato la morfologia dello spray di gasolio e biodiesel per elevate pressioni di iniezione mostrando un maggior ritardo di iniezione e una maggiore penetrazione assiale per il biodiesel: ciò è dovuto alla sua maggiore viscosità ed al maggior calore di vaporizzazione. Proprio queste proprietà portano ad una minore atomizzazione in confronto al gasolio. Inoltre, uno studio parametrico sull'atomizzazione del biodiesel, condotto da He [9] al variare della durata dell'iniezione e della pressione ambiente, ha mostrato che sia la penetrazione assiale che l'angolo d'apertura dello spray aumentano con la durata della iniezione, mentre ha evidenziato come l'effetto della pressione ambiente sia maggiore di quello della pressione di iniezione.

In definitiva, l'obiettivo delle simulazioni relative all'iniezione è stato quello di mettere in relazione due campi di studio molto trattati negli ultimi anni permettendo così di analizzare il fenomeno e la morfologia dello spray tenendo però conto della cavitazione e del flusso che si sviluppano all'interno dell'iniettore.

5.2 *La mesh adottata nelle simulazioni dell'iniettore e dello spray*

Per lo sviluppo di tali simulazioni è stato necessario creare due diversi domini computazionali. Tali mesh sono state entrambe generate con il software *Pointwise*.

5.2.1 *La mesh per il flusso all'interno dell'iniettore*

Per quanto riguarda le simulazioni relative all'interno dell'iniettore, è stato modellato un iniettore mini-sac (Figura 5.1).

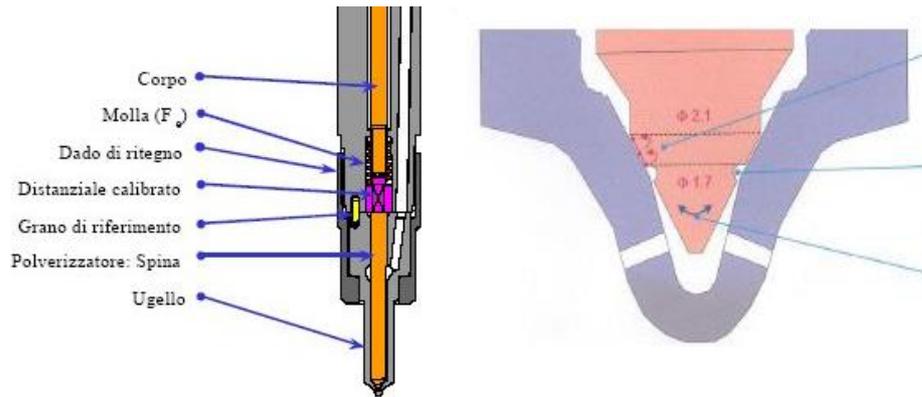


Figura 5.1 Parte terminale di un iniettore e forma dell'iniettore mini-sac.

In tale tipologia di iniettore l'alimentazione avviene da un piccolo volume a valle della zona di tenuta tra lo spillo e la sua sede; lo spillo è tenuto in posizione chiusa, a riposo, da una molla [10]. Prevede quindi due posizioni fondamentali che portano alle seguenti condizioni di funzionamento:

- solenoide diseccitato e spillo chiuso per effetto della forza di precarico della molla che collega lo spillo alla testa dell'iniettore; in questo caso entrambi i lati dello spillo sono soggetti alla pressione di iniezione e quindi la forza di pressione risultante è nulla (posizione A, Figura 5.2);
- solenoide eccitato e apertura della luce di ritorno; in questo caso la pressione nel polverizzatore è maggiore di quella nel volume di controllo e la forza di pressione che tende ad alzare lo spillo è maggiore della forza di precarico della molla; lo spillo si apre e il combustibile entra nel cilindro (posizione B, Figura 5.2).

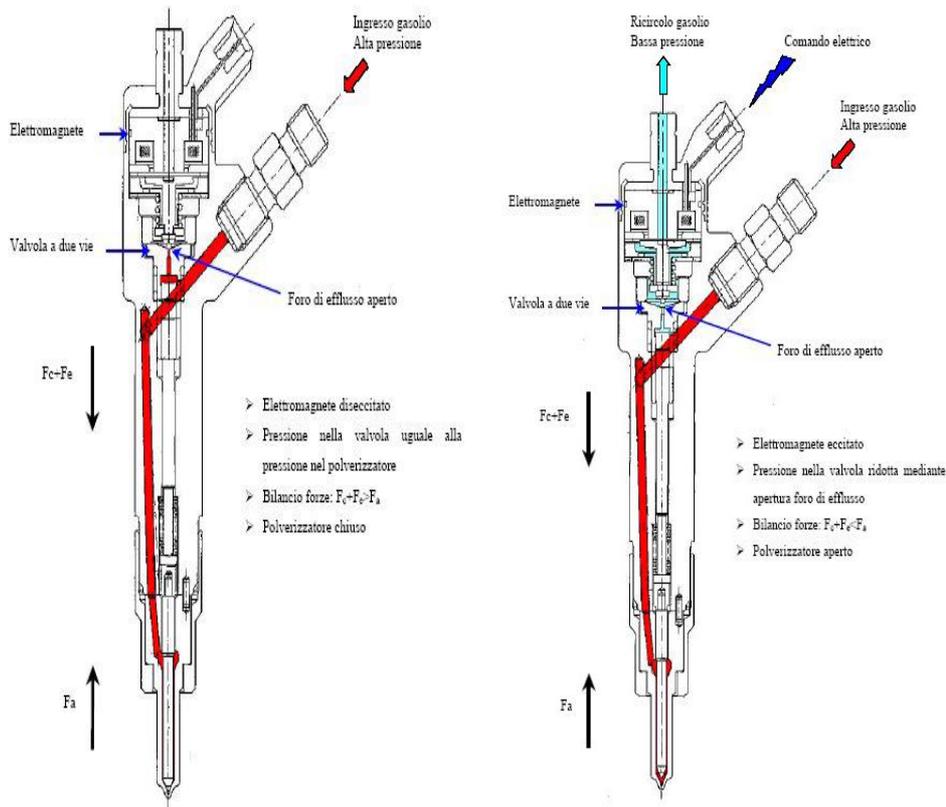


Figura 5.2 Posizione A e B dell'iniettore.

Per le simulazioni dell'interno dell'iniettore il dominio computazionale adottato è stato quello mostrato in Figura 5.3. In particolare, in virtù della simmetria del flusso, per ridurre gli oneri computazionali è stato creato un volume di controllo relativo ad un solo quarto della geometria dell'iniettore durante la configurazione che vede l'ago in posizione di piena apertura. Ciò ha permesso di simulare i diversi casi in regime stazionario favorendo un più facile accoppiamento con quelle che sono state le successive simulazioni relative allo spray.

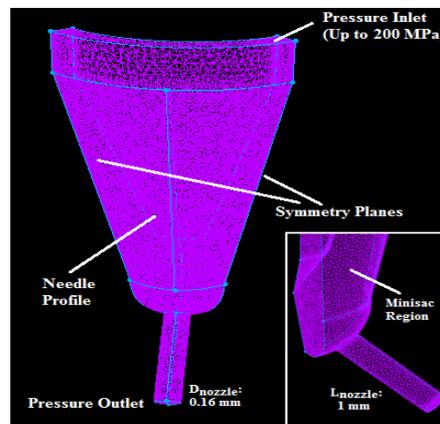


Figura 5.3 Il dominio computazionale e le sue condizioni al contorno.

La mesh utilizzata è di tipo non strutturato ed è costituita da 230.000 celle. La densità di tale mesh si è mostrata idonea a fornire risultati indipendenti dalla griglia stessa.

	Valori
Pressione di iniezione	Minima P_{inj} : 100 MPa Massima P_{inj} : 200 MPa ΔP_{inj} : 10 MPa tra i casi simulati
Pressione ambiente	15 e 30 kg/m ³
Posizione dello spillo	Completa apertura
Geometria dell'iniettore	D_{nozzle} : 0.16 mm
	L_{nozzle} : 1 mm
	angolo: 110°
	Sharp edge

Tabella 5.1 Condizioni al contorno relative alle simulazioni del flusso interno dell'iniettore.

Per quanto riguarda le *boundary conditions* la Tabella 3.1 riassume i principali parametri adottati sia per le simulazioni relative al gasolio che per quelle riguardanti il biodiesel. In particolare, sono state simulate pressioni di iniezione via via crescenti di 10 MPa di caso in caso a partire da 100 MPa fino ad un massimo di 200MPa. Inoltre tali simulazioni sono state realizzate per due differenti valori di densità ambientale, pari a 15 e 30 kg/m³. Ciò allo scopo di verificare l'effetto, non solo della pressione di iniezione, ma anche della pressione ambientale in cui il combustibile viene iniettato.

5.2.2 La mesh per lo spray

Per quanto riguarda le simulazioni dello spray è stata invece adottata una mesh di geometria cilindrica a base quadrata di tipo strutturato con dimensione base della griglia di 2 mm. La geometria prismatica, oltre ad offrire una estrema facilità nella costruzione della mesh, ha permesso di avere tutte celle quadrate. Gli angoli formati della griglia sono quindi di 90° ed il rapporto d'aspetto delle singole celle risulta pari a 1 con i vantaggi dal punto di vista computazionale che ciò comporta.

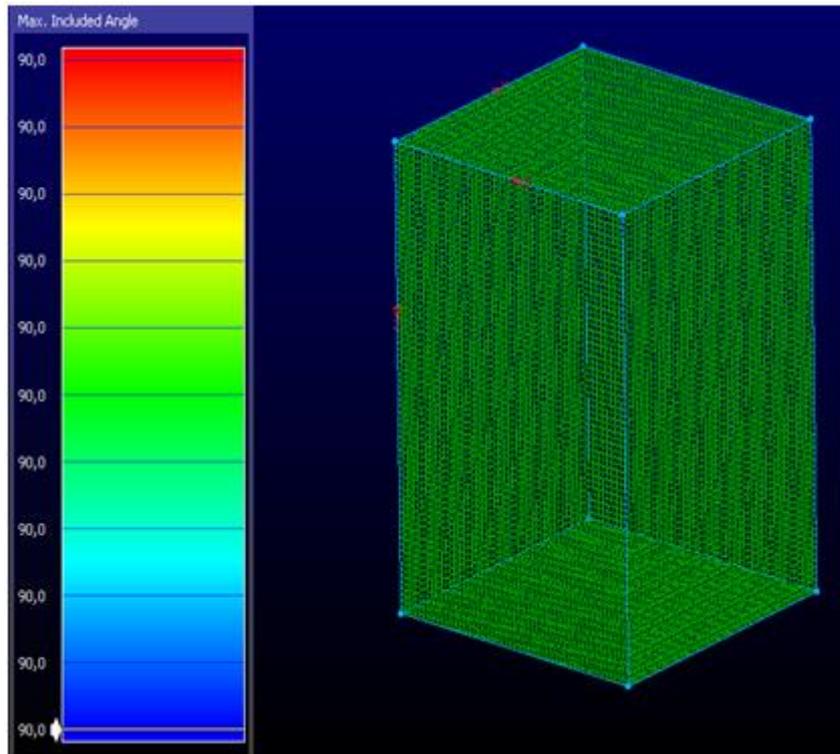


Figura 5.4 Mesh adottata per le simulazione dello spray ed angoli formati dalla griglia.

La mesh consta quindi di circa 187.500 celle (Figura 5.4). Le dimensioni globali del volume di controllo sono 100mm x 100mm x 150mm. Le simulazioni effettuate su tale mesh sono state ovviamente di tipo transitorio e, durante le stesse, è stata adottato un metodo dinamico di raffinamento della griglia noto come *Automatic Mesh Refinement* (AMR). Tale procedura ha permesso di seguire il fenomeno dello spray con una mesh più fitta proprio dove si venivano a creare i maggiori gradienti dovuti al break-up del combustibile. In particolare, il raffinamento della griglia è stato realizzato in base al gradiente di concentrazione del combustibile. Seguendo tale metodologia, è stato possibile infittire maggiormente la mesh in prossimità della sezione di uscita dell'iniettore e nella zona in cui avviene il break-up. Ovviamente, nelle zone non interessate dallo spray, il gradiente di concentrazione del combustibile è pressoché nullo in virtù della dispersione dello stesso ed il grado di infittimento della mesh risulta essere volutamente minore (Figura 5.5).

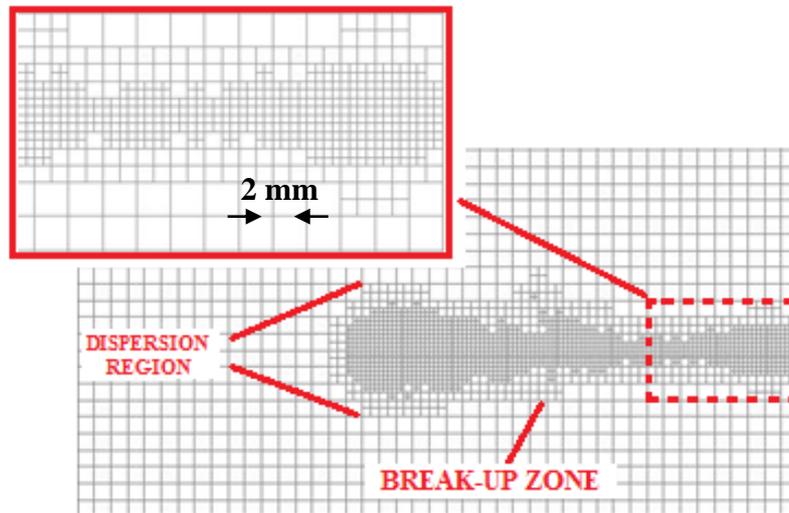


Figura 5.5 Infitimento della mesh sulla base del gradiente di concentrazione.

Tale metodologia offre il vantaggio di avere una mesh fitta proprio dove necessario, riducendo così gli oneri computazionali. Ulteriore vantaggio è quello di adottare una corretta densità di griglia nella regione di break-up, la quale non può essere nota a priori.

5.3 I combustibili simulati

Come detto in precedenza, le simulazioni hanno avuto come oggetto l'analisi del comportamento nella fase di iniezione di due diversi combustibili, il gasolio ed il biodiesel, proprio per avere indicazioni sul diverso comportamento dei due fuels. Le proprietà chimiche e fisiche di tali carburanti (Tabella 5.2) hanno ovviamente effetti sul comportamento del flusso all'interno dell'iniettore, così come nel fenomeno di break-up e sullo sviluppo dello spray. Si è resa quindi necessaria una accurata definizione di tali parametri in modo da rendere affidabili e validi i risultati ottenuti.

Tabella 5.2 Proprietà dei combustibili.

Tipo di combustibile	Diesel	BDFc
Densità @ 15 °C [kg/m ³]	830	885.1
Viscosità @ 30 °C (mm ² /s)	3.36	4.45
Tensione superficiale (mN/m)	25.2	25.7
Numero di cetano	55	49.9
Potere calorifico (MJ/kg)	43.1	39.03
Tensione di vapore @ 25 °C [11]	1000	1
C/H/O (wt.%) contenuto in massa	86.1/13.8/ < 1	77.1/12.0/10.6

Spiccano i diversi valori delle proprietà fisiche, come la densità e la tensione di vapore. In particolare, nelle simulazioni che saranno di seguito descritte, sono stati adottati i parametri relativi al gasolio ed al tipo di biodiesel per i quali si disponeva di dati sperimentali in modo da avere un raffronto diretto. Ci si è quindi riferiti ad un gasolio riportante le caratteristiche sintetizzate nella tabella sopra riportata ed ad un biodiesel rigenerato (waste cooking oil, BDFc) prodotto da oli di scarto.

5.4 La trattazione matematica per il flusso cavitante

Il modello computazionale impiegato per la valutazione della cavitazione si basa sull'approccio proposto da Singhal [12]. Tale modello prevede lo studio di una miscela di due fasi: il combustibile liquido ed il vapore ed il gas non condensabile. Quest'ultimo viene considerato compressibile mentre il liquido ed il vapore vengono considerati incompressibili e in condizione di non scorrimento reciproco. Il comportamento di tale miscela è valutato tramite le equazione di continuità e della quantità di moto mediate alla Reynolds. Il modello di chiusura previsto è il *Realizable k - ε* con *Enhanced Wall Function* per tener conto degli alti gradienti di pressione:

$$\frac{\partial \rho u_j k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + P - \rho \epsilon \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u_j \epsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{\epsilon}{k} \left[c_1 P - c_2 \rho \epsilon + c_3 \rho k \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] \quad (2)$$

Dove il termine di produzione è espresso come:

$$P = \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \left[\rho k + \mu_t \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right] \quad (3)$$

La viscosità turbolenta μ_t è calcolata per l'intera miscela, mentre la sua densità e viscosità viene valutata secondo le seguenti equazioni:

$$\rho = \alpha_v \rho_v + (1 - \alpha_v - \alpha_g) \rho_l + \alpha_g \rho_g \quad (4)$$

$$\mu = \alpha_v \mu_v + (1 - \alpha_v - \alpha_g) \mu_l + \alpha_g \mu_g \quad (5)$$

dove i pedici v, l, g sono rispettivamente per il vapore, il liquido e per la fase gassosa. La relazione tra la frazione in massa (f) e la frazione in volume (α) è data da:

$$\alpha_v = f_v \frac{\rho}{\rho_v}, \quad \alpha_l = f_l \frac{\rho}{\rho_l}, \quad \alpha_g = f_g \frac{\rho}{\rho_g} \quad (6)$$

Così la densità della miscela può essere espressa come:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{f_v}{\rho_v} + \frac{1 - f_v - f_g}{\rho_l} + \frac{f_g}{\rho_g} \quad (7)$$

L'equazione di trasporto per la frazione in massa di vapore è valutata come:

$$\rho \frac{\partial u_j f_v}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial f_v}{\partial x_j} \right) + R_e - R_c \quad (8)$$

dove Γ è il coefficiente di diffusione e R_e , R_c sono il tasso di generazione e condensazione del vapore, a loro volta valutati come [13]:

$$R_e = C_e \frac{\sqrt{k}}{\sigma} \rho_l \rho_v (1 - f_v - f_g) \sqrt{\frac{2(p_v - p)}{3\rho_l}}, \quad (p_v > p) \quad (9)$$

$$R_c = C_c \frac{\sqrt{k}}{\sigma} \rho_l \rho_v f_v \sqrt{\frac{2(p - p_v)}{3\rho_l}} \quad (p_v < p) \quad (10)$$

In tali espressioni p e k sono la pressione statica e l'energia cinetica turbolenta locale, mentre σ e p_v indicano la tensione superficiale e la pressione di vapore del fluido. Il modello tiene conto anche delle fluttuazioni della pressione dovute alla turbolenza valutando la variazione di pressione ad una specifica temperatura in funzione del cambiamento di fase:

$$p_v = p_{\text{sat}} + \frac{p_{\text{turb}}}{2} = p_{\text{sat}} + 0.195pk \quad (11)$$

5.5 Il modello wave per il break-up dello spray

I modelli di atomizzazione più diffusi in letteratura sono il TAB (*Taylor Analogy Break-up*), sviluppato da Amsden e O'Rourke ed il modello d'onda superficiale, meglio noto come Wave Model, elaborato da Reitz [14]. Il modello di instabilità delle onde superficiali WAVE Model, adottato nelle simulazioni dello spray, considera che il liquido sia iniettato come particelle discrete di gocce o 'blobs', la cui misura decresce con il tempo in seguito al fenomeno di break-up (Figura 5.6). A queste particelle iniziali, dopo il fenomeno di atomizzazione, si vanno a sommare nuove particelle computazionali quando la massa delle gocce "figlie" raggiunge un valore superiore ad una percentuale fissata della massa totale iniettata. Il metodo di break-up, descritto in dettaglio da Reitz e Diwakar, esamina la stabilità di una superficie di

colonna liquida sottoposta a perturbazioni, utilizzando una teoria lineare del primo ordine. La misura delle gocce "figlie" è appunto determinata dal valore della lunghezza d'onda delle onde instabili sulla superficie dei blobs [15].

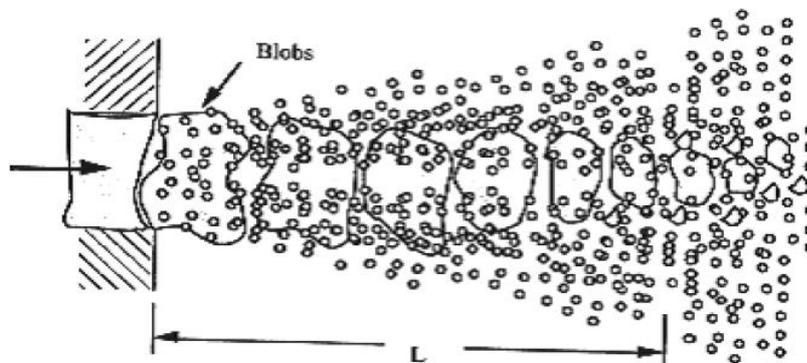


Figura 5.6 La formazione dello spray nel modello WAVE.

Tale modello, usato sia per il break-up primario che secondario, risulta particolarmente adatto per gli spray caratterizzati da un alto numero di Weber, come è il caso delle iniezioni ad alta pressione in campo motoristico. Come detto, le particelle sono iniettate dall'iniettore come gocce di liquido con raggio caratteristico r_0 . L'atomizzazione e le risultanti gocce figlie sono ritenute di raggio proporzionale alla lunghezza d'onda della perturbazione superficiale destabilizzante più veloce Λ [15]:

$$r = B_0 \Lambda \quad (12)$$

in cui B_0 è una costante del modello pari a 0,61 e Λ :

$$\Lambda = 9.02 r_0 \frac{(1 + 0.45 Oh^{0.5})(1 + 0.4 Ta^{0.7})}{(1 + 0.87 We_f^{1.67})^{0.6}} \quad (13)$$

con Oh , Ta , We_f rispettivamente il numero di Ohnesorge, di Taylor e di Weber relativamente al combustibile.

La legge di variazione (e più precisamente di diminuzione) del raggio della goccia madre, in seguito al fenomeno di break-up, è invece data da:

$$\frac{dr}{dt} = - \frac{r_0 - r}{\tau} \quad (14)$$

Il tempo di break up è valutato invece come:

$$\tau = \frac{3.726 B_1 r_0}{\Lambda \Omega} \quad (15)$$

τ è il tempo di break-up che è influenzato dai livelli di disturbo iniziali del getto, dalla turbolenza del flusso e dal disegno del polverizzatore; B_1 è una costante empirica che varia per ogni regime di break-up e r_0 è il raggio iniziale. Nelle simulazioni B_1 è stato posto pari al valore 1,73, come raccomandato in [16]. Ω invece è il massimo tasso di crescita della perturbazione e tiene conto sia dell'interazione della fase liquida con l'aria sia dei parametri fisici caratterizzanti il combustibile iniettato tramite la relazione riportata di seguito:

$$\Omega = \frac{\sigma}{\rho_{\text{air}} r_0^3} \frac{(0.34 + 0.38 We_f^{1.5})}{(1 + Oh)(1 + 1.4 Ta^{0.6})} \quad (16)$$

In tale modello il numero di gocce quindi incrementa nel tempo e, come già accennato, nuove particelle computazionali sono aggiunte a quelle già esistenti una volta che la massa sottratta alla massa iniziale è maggiore o uguale al 3% della massa media iniettata. Dopo ogni evento di break-up, alle nuove particelle viene assegnata la stessa temperatura ed allocazione fisica delle gocce "madri", aggiornando le componenti di velocità radiali e tangenziali ed il raggio.

Come in altre simulazioni di spray non evaporanti, la teoria di O'Rourke è stata usata per le collisioni tra le particelle ed il *drag coefficient* tiene conto della variazione della forma delle gocce dovuta all'interazione con l'aria circostante.

5.6 I risultati delle simulazioni dell'iniettore

Per quanto riguarda le simulazioni del flusso all'interno dell'iniettore è stato analizzato il range di pressione 100-200 MPa che rappresenta le condizioni operative tipiche dei moderni sistemi common rail.

Entrambi i carburanti, anche se con caratteristiche diverse, hanno evidenziato il formarsi di vapore nella zona superiore dell'orifizio dell'iniettore, in prossimità della superficie dove si manifesta il gradiente di pressione massimo. Come evidente dalla Figura 5.7, che mostra la frazione in volume di vapore presente nel condotto dell'iniettore per entrambi i combustibili alla pressione di iniezione di $p_{inj} = 200 \text{ MPa}$ e densità ambiente pari a $\rho_{amb} = 30 \text{ kg/m}^3$, per il gasolio la cavitazione risulta essere estesa a tutta la lunghezza del condotto. Inoltre, il gasolio, in corrispondenza della sezione di uscita, presenta una frazione in volume di vapore maggiore. Viceversa per il biodiesel la frazione di vapore interessa solo la parte iniziale del condotto. Per tale

biocombustibile il vapore si forma solo nella zona alta della sezione di ingresso del condotto in quanto, il recupero di pressione che si ha quando viene superata questa zona, permette di raggiungere pressioni maggiori a quella della tensione di vapore del biodiesel stesso. Questo significa che il vapore prodotto è consumato dopo pochi millimetri e che alla sezione di uscita è presente biodiesel nella sola fase liquida.

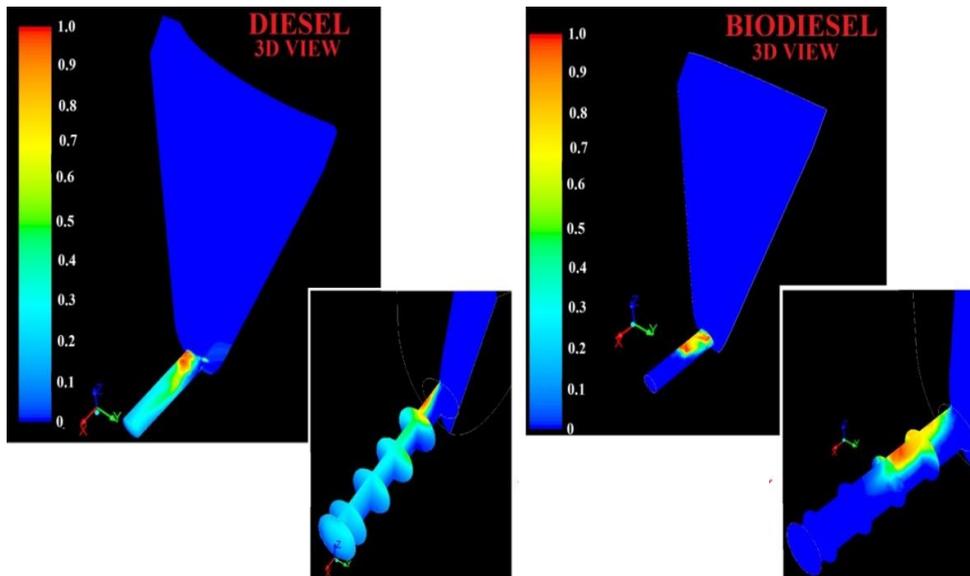


Figura 5.7 Frazione di vapore per $p_{inj} = 200 \text{ MPa}$ e $\rho_{amb} = 30 \text{ kg/m}^3$.

Quanto detto può considerarsi una differenza generale tra il biodiesel e il gasolio. Infatti tale tendenza è stata verificata in ognuna delle diverse condizioni operative simulate. In termini di efficacia di atomizzazione, questo aspetto rappresenta sicuramente uno svantaggio per il biodiesel. Infatti la cavitazione promuove il break-up del getto liquido. Inoltre, non è da trascurare l'effetto della cavitazione sulla densità del carburante iniettato in quanto determina un diverso valore della quantità complessivamente iniettata e di conseguenza una diversa potenza erogata dal motore (Figura 5.8). Per il gasolio, la presenza della fase vapore alla sezione di uscita riduce il valore medio della densità. Questo è ancor più evidente al crescere della pressione di iniezione e al decrescere della pressione ambiente. In particolare, per la pressione di iniezione di 200 MPa e densità ambiente di 15 kg/m³ la differenza percentuale della densità del combustibile con quella nominale raggiunge il massimo valore (circa il 6%). Viceversa la densità del biodiesel non è affetta da una variazione sensibile: è quindi deducibile che le piccole differenze con il valore nominale siano esclusivamente da

imputare alla diversa temperatura rispetto a quella di riferimento di 300 K, visto il leggero aumento della stessa di 8-10 K nella sezione di uscita.

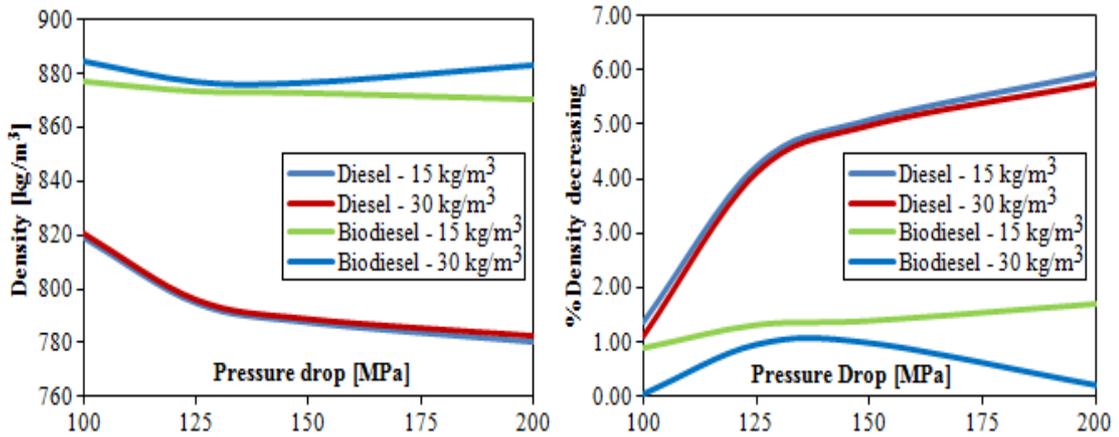


Figura 5.8 Densità alla sezione di uscita e differenza percentuale con quella nominale.

Si è analizzata anche quella che è la velocità media del flusso in corrispondenza della sezione di uscita ed è stato possibile notare come il gasolio sia caratterizzato da una velocità media maggiore a parità di condizioni operative (Figura 5.9). Ciò per effetto della minore viscosità. La viscosità è uno dei parametri più importanti nell'atomizzazione e formazione dello spray. Un più alto valore della viscosità ritarda il break-up e produce una minore atomizzazione del combustibile come verrà anche verificato con le simulazione relative allo spray.

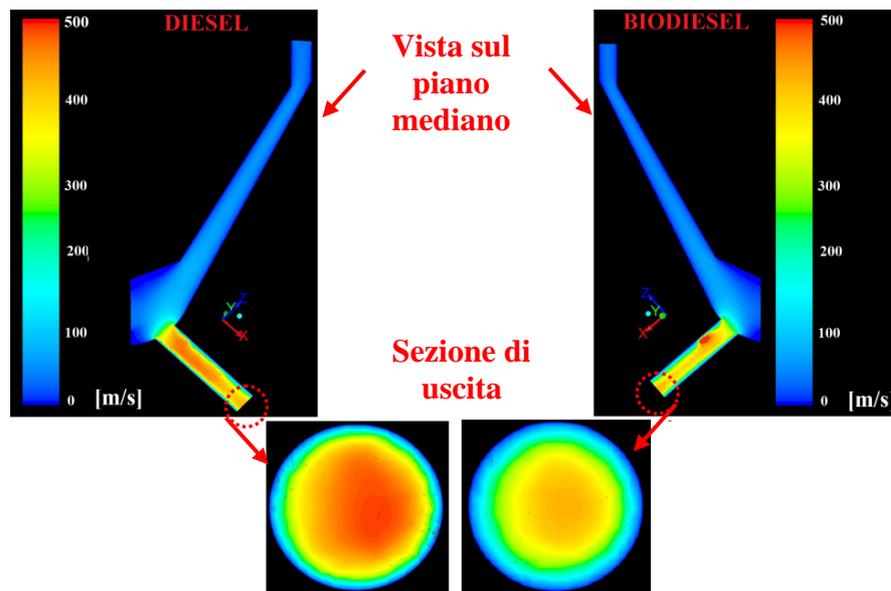


Figura 5.9 Velocità del flusso nel piano mediano ed in corrispondenza della sezione di uscita.

La differenza di velocità, e di conseguenza della portata in massa, in corrispondenza della sezione di uscita, porta ad avere una minore quantità di biodiesel iniettato nel cilindro del motore rispetto al gasolio fissata la durata di iniezione. Considerando anche il minore potere calorifico del biodiesel ci si può quindi aspettare una minore energia introdotta per il biodiesel nonostante l'effetto della cavitazione sulla densità del diesel convenzionale.

	Densità ambiente 15 kg/m ³		Densità ambiente 30 kg/m ³	
	Diesel – Portata in massa [kg/s]	Biodiesel - Portata in massa [kg/s]	Diesel - Portata in massa [kg/s]	Biodiesel - Portata in massa [kg/s]
100 MPa	0.0063	0.0056	0.0057	0.0055
125 MPa	0.0066	0.0062	0.0063	0.0061
150 MPa	0.0071	0.0069	0.0069	0.0068
200 MPa	0.0085	0.0082	0.0081	0.0080

Tabella 5.3 Portata in massa per quattro valori differenti di pressione di iniezione.

Si è inoltre investigato quello che è l'effetto della temperatura sul comportamento dei combustibili. L'aumento della temperatura porta a limitare quelle che sono le differenze di viscosità tra i due carburanti considerati (Tabella 5.4). Di seguito si riportano quindi i valori relativi alle proprietà del biodiesel, alla velocità ed alla portata alla sezione di uscita in funzione della pressione di iniezione confrontandoli con quelli del gasolio, il tutto per diverse temperature fino al valore di 360 K e per densità dell'aria ambiente pari a 15 kg/m³ (Figura 5.10)

	Temperatura di iniezione [K]	Viscosità dinamica [Ns/m ²]	Densità [kg/m ³]
Biodiesel	300	0.00694	881.2
	315	0.00520	874.9
	330	0.00450	863.8
	360	0.00261	849.6
Diesel	300	0.00212	827.6

Tabella 5.4 Viscosità e densità del biodiesel a differenti temperature.

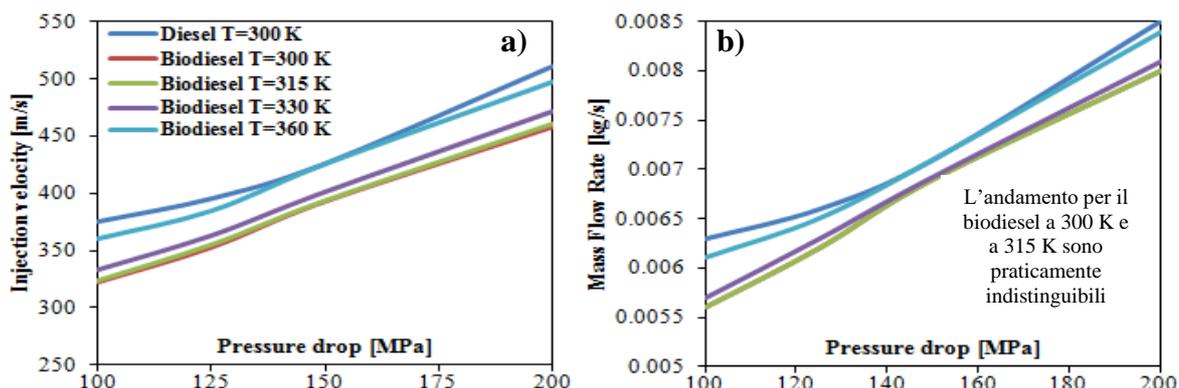


Figura 5.10 Effetto della temperature sulla velocità a) e sulla portata in massa b).

La minore differenza in termini di viscosità nel range 130-180 MPa a 360 K si traduce nel fatto che sia la velocità che la portata presentino differenze trascurabili (Figura 5.10). In queste condizioni il diverso potere calorifico è perciò il solo responsabile per la minore potenza introdotta nel caso di alimentazione con biodiesel, a parità di condizioni operative. Tuttavia, occorre considerare che l'aumento della temperatura riduce il ritardo di ignizione e può anche comportare un leggero aumento delle emissioni di NO_x .

5.7 I risultati delle simulazioni dello spray

Come detto, proprio tali simulazioni relative all'interno dell'iniettore sono state sfruttate per le successive simulazioni relative allo spray. Per poter tener conto di quanto detto riguardo la cavitazione si è quindi utilizzato nelle simulazioni dello spray il modello di iniettore *Plain Orifice Atomizer* (POA) il quale permette di impostare come input le principali quantità fisiche. Inoltre, tale modello permette durante le simulazioni di riconoscere il regime in cui il flusso si trova. In particolare, permette di valutare se si tratta di un regime che presenta la sola fase liquida, se si ha cavitazione parziale (cavitating) o se quest'ultima interessa l'intero nozzle (*flipped*).

Il *plain orifice* è tra i più comuni degli iniettori e anche il più costruito. Nonostante ciò, la fisica caratterizzante il flusso interno all'iniettore e la modellizzazione della successiva atomizzazione esterna non è affatto semplice. Nel plain-orifice modellato in ANSYS FLUENT, il liquido è accelerato all'interno di un ugello, forma un getto di liquido e poi si disgrega in goccioline dando vita al break-up. Come detto, questo iniettore può operare sotto tre differenti regimi: in singola fase, in

cavitazione o “*flipped*” (Figura 5.11). La transizione tra questi regimi è brusca e può produrre tipi di spray decisamente differenti l’uno dall’altro. Il regime interno all’iniettore determina la velocità del getto all’uscita dello stesso, così come la dimensione delle gocce inizialmente prodotte e l’angolo di dispersione.

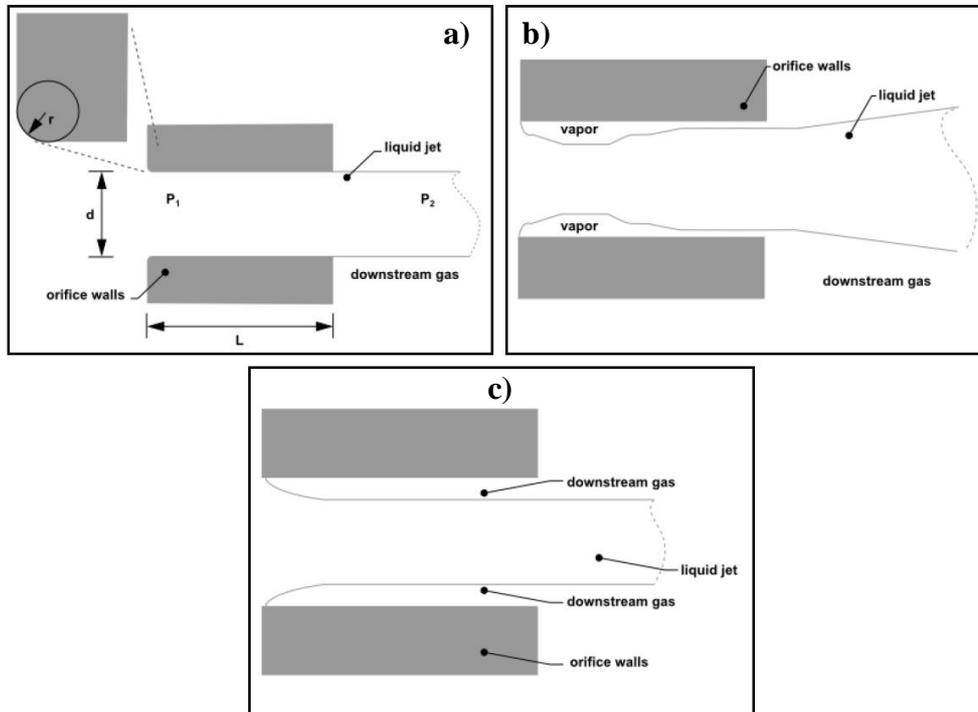


Figura 5.11 Regimi di flusso interno all’iniettore: singola fase (a), cavitante (b) e “*flipped*” (c).

Per prevedere con precisione le caratteristiche dello spray, il modello del plain orifice deve identificare lo stato del flusso interno all’ugello perché questo ha un enorme effetto sulle sue caratteristiche. Per fare ciò, sono necessari alcuni parametri dimensionali utili per studiarne il flusso (Tabella 5.5), che se combinati possono formare alcuni numeri adimensionali importanti, come r/d o L/d o gruppi adimensionali come il numero di Reynolds basato sull’“hydraulic head” (Re_h) e il parametro di cavitazione (K).

PARAMETRI	VALORI
Diametro dell’iniettore	d
Lunghezza dell’iniettore	L
Raggio di curvature dell’angolo dell’iniettore	r
Pressione a monte	p_1
Pressione a valle	p_2
Viscosità	μ
Densità del liquido	ρ_l
Pressione di vapore	p_v

Tabella 5.5 Parametri di input per l’iniettore plain-orifice.

$$Re_h = \frac{d\rho_l}{\mu} \sqrt{\frac{2(p_1 - p_2)}{\rho_l}} \quad (17)$$

$$K = \frac{p_1 - p_v}{p_1 - p_2} \quad (18)$$

Il flusso di liquido nell'ugello spesso di contrae, ovvero non coinvolge l'intera sezione dell'ugello, come si può vedere nella Figura 5.11 b) e c). È spesso utile usare un coefficiente di contrazione C_c per rappresentare la riduzione dell'area trasversale di passaggio del liquido. Questo coefficiente è definito come il rapporto tra l'area coinvolta dal flusso di liquido e l'area totale della sezione dell'iniettore.

$$C_c = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{C_{ct}^2} - \frac{11.4r}{d}}} \quad (19)$$

dove C_{ct} è una costante teorica posta uguale a 0.611, valore che è ricavato dall'analisi del flusso potenziale di iniettori "flipped".

Un altro parametro importante è il coefficiente C_d definito come il rapporto tra la portata in massa reale attraverso l'iniettore e quella teorica massima attraverso la stessa sezione:

$$C_d = \frac{\dot{m}_{eff}}{A\sqrt{2\rho_l(p_1 - p_2)}} \quad (20)$$

dove \dot{m}_{eff} è la portata in massa realmente passante nell'iniettore, definita come

$$\dot{m}_{eff} = \frac{2\pi\dot{m}}{\Delta\phi} \quad (21)$$

in cui \dot{m} è la portata in massa specificata nel software e $\Delta\phi$ è la differenza tra l'angolo di stop azimutale e l'angolo di start azimutale.

Il numero K della cavitazione è molto importante; per flussi in incipiente cavitazione il suo valore è intorno a $K \approx 1.9$ per iniettori con basso rapporto L/d . Per includere anche gli effetti della viscosità e del raggio di ingresso all'ugello, viene utilizzata la seguente relazione:

$$K_{incip} = 1.9 \left(1 - \frac{r}{d}\right)^2 - \frac{1000}{Re_h} \quad (22)$$

In modo simile si definisce il K_{crit} a cui corrisponde instaurarsi del regime "flipped":

$$K_{crit} = 1 + \frac{1}{\left(1 + \frac{L}{4d}\right) \left(1 + \frac{2000}{Re_h}\right) e^{70r/d}} \quad (23)$$

Per valori di r/d maggiori di 0.05 si ritiene impossibile la presenza del regime “flipped” e viene posto $K_{crit} = 1$.

Per identificare lo stato dell’ugello viene confrontato il valore di K con i K_{crit} e K_{incip} , come esposto in Figura 5.12.

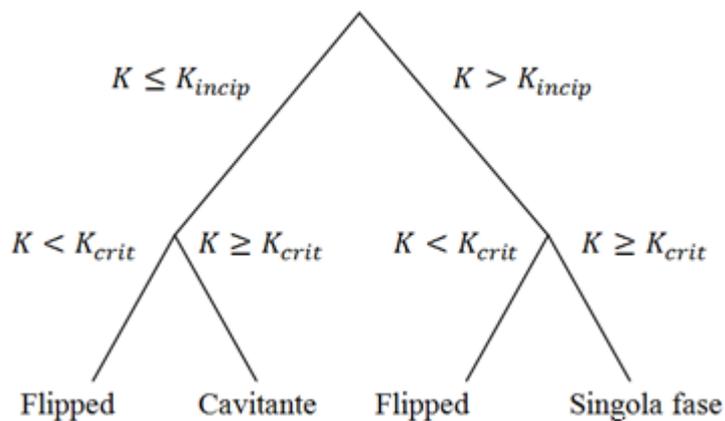


Figura 5.12 Flow chart per la determinazione del numero di fasi all’interno dell’iniettore.

In base al regime risultante nell’iniettore, è utilizzata una singola chiusura per le equazioni sopra riportate.

Singola fase

Nel caso di singola fase ($K > K_{incip}, K \geq K_{crit}$) si ha:

$$C_d = \frac{1}{\frac{1}{C_{du}} + 20 \frac{\left(1 + 2.25 \frac{L}{d}\right)}{Re_h}} \quad (24)$$

dove $C_{du} = 0.827 - 0.0085 L/d$

Flusso cavitante

Nel caso di flusso cavitante ($K_{crit} \leq K \leq K_{incip}$) si ha:

$$C_d = C_c \sqrt{K} \quad (25)$$

Iniettore “flipped”

Nel caso di regime “flipped” ($K < K_{crit}$) si ha:

$$C_d = C_{ct} = 0.611 \quad (26)$$

Si è quindi proceduto utilizzando i valori medi pesati sulla massa di velocità, densità ed energia cinetica turbolenta (TKE) ottenuti per le pressioni di iniezione di 100 e 200 MPa e densità ambiente di 15 e 30 kg/m³ dalle simulazioni sul flusso all'interno dell'iniettore per valutare la portata in portata in massa e successivamente il coefficiente di efflusso C_d: come detto, tali dati sono stati poi utilizzati come input nell'impostare le simulazioni relative allo spray (Figura 5.13). La portata in massa è stata valutata tramite la seguente relazione:

$$m_{\text{fuel}} = V_g A \rho_f \quad (27)$$

dove A è la sezione di passaggio dell'iniettore in corrispondenza della sezione di uscita, ρ_f è la densità del combustibile valutata tenendo conto di quanto espresso in Figura 5.8, e la velocità è stata valutata come:

$$V_g = C_d \sqrt{\frac{2*(P_{\text{inj}} - P_a)}{\rho_f}} \quad (28)$$

Il valore del coefficiente di efflusso, C_d, è stato ricavato dalle simulazioni relative all'interno dell'iniettore. Tali simulazioni hanno evidenziato come, viscosità e tensione superficiale differenti per gasolio e biodiesel, incidano notevolmente sul fenomeno ed influenzino il flusso ad alta velocità all'interno dell'orifizio, determinando la vaporizzazione del combustibile sullo strato di fluido a contatto con la parete. Ciò porta ad un restringimento della sezione ed alla conseguente variazione sulla velocità di uscita del combustibile. La Tabella 5.6 riassume i valori ottenuti per le simulazioni prese a riferimento.

		100 MPa	200 MPa	
<i>Diesel</i>	Velocità (m/s)	375,57	512,08	15 kg/m ³
	Cd	0,77	0,74	
	Velocità	341,85	487,68	30 kg/m ³
	Cd	0,705	0,707	
<i>Biodiesel</i>	Velocità (m/s)	321,89	473,95	15 kg/m ³
	Cd	0,677	0,703	
	velocità	316,5	459,35	30 kg/m ³
	Cd	0,67	0.683	

Tabella 5.6 Velocità e coefficiente di efflusso nei vari casi simulati.

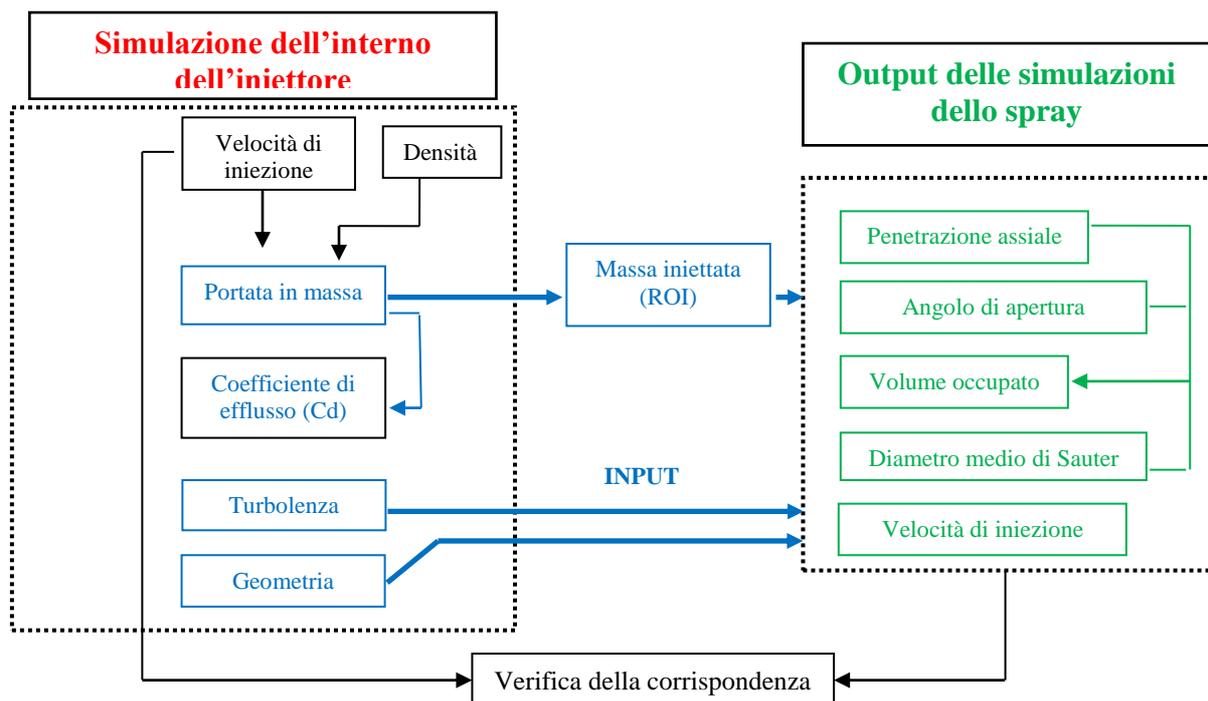


Figura 5.13 Accoppiamento dei due diversi tipi di simulazione.

Introducendo quindi la portata in massa come input delle simulazioni dello spray ed adottando il modello Plain Orifice Atomizer per l'iniettore, il profilo di iniezione risulta automaticamente definito.

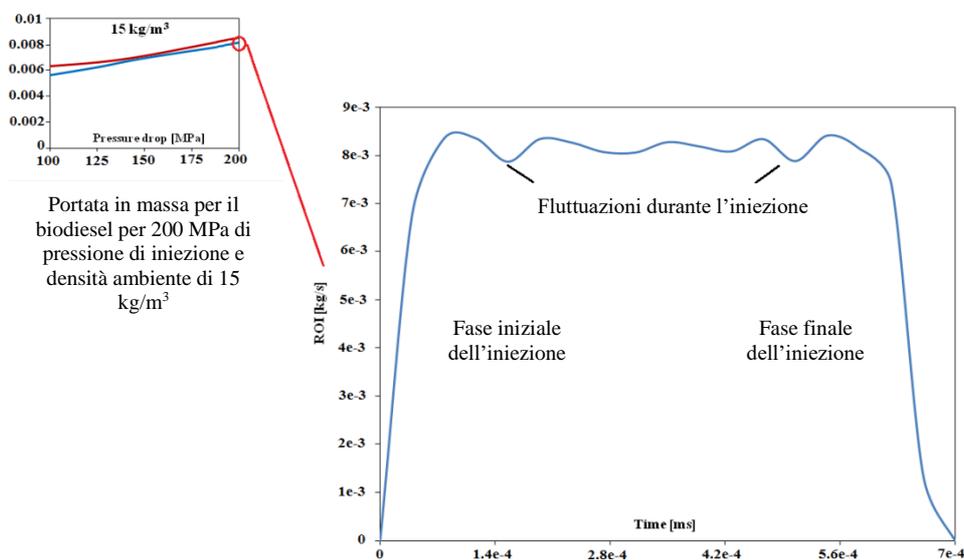


Figura 5.14 Accoppiamento della portata in massa con il profilo di iniezione.

Tuttavia, con tale metodo, risulta esserci un piccolo errore in quanto la durata del transitorio nelle simulazioni dello spray è stata fissata in modo opportuno ma l'inizio e la fine dell'iniezione sono modellati dal software come una rampa. Ne segue quindi che la portata in massa durante tali fasi transitorie abbia un valore minore rispetto a quanto ricavato dalle simulazioni del flusso all'interno dell'iniettore. Difatti la massa di combustibile iniettata viene sottostimata commettendo un errore pari al 5-7%. Si è quindi potuto procedere valutando la velocità del flusso risultante nelle simulazioni dello spray in corrispondenza della massima portata in massa iniettata e confrontandola con i valori ottenuti nelle simulazioni dell'interno dell'iniettore. Tale valore, nel modello POA, viene valutato tramite un coefficiente di contrazione (C_c) definito come l'area interessata effettivamente dal flusso liquido rapportata a quella disponibile (area della sezione di uscita dell'iniettore [17]). Si tiene così conto dell'effetto della cavitazione e, a conferma di quanto ottenuto nelle simulazioni relative all'iniettore, tale coefficiente risulta pari a 1 per il biodiesel in quanto è presente la sola fase liquida. I valori della velocità del flusso iniettato risultano quindi essere in linea con quanto detto come si può osservare dalla tabella seguente.

	<i>Diesel</i>				<i>Biodiesel</i>			
	Densità ambiente: 15 kg/m ³		Densità ambiente: 30 kg/m ³		Densità ambiente: 15 kg/m ³		Densità ambiente: 30 kg/m ³	
	Interno iniettore (m/s)	POA (m/s)	Interno iniettore (m/s)	POA (m/s)	Interno iniettore (m/s)	POA (m/s)	Interno iniettore (m/s)	POA (m/s)
<i>p_{inj} – 100 MPa</i>	375.85	385.81	341.85	351.08	321.90	314.72	316.68	309.10
<i>p_{inj} – 200 MPa</i>	511.43	540.62	487.59	515.18	458.19	449.60	470.34	460.84

Tabella 5.7 Velocità di efflusso ottenute dalle simulazioni.

L'accoppiamento delle due diverse serie di simulazioni è risultato essere più che buono portando a valori che si discostano di pochi punti percentuali.

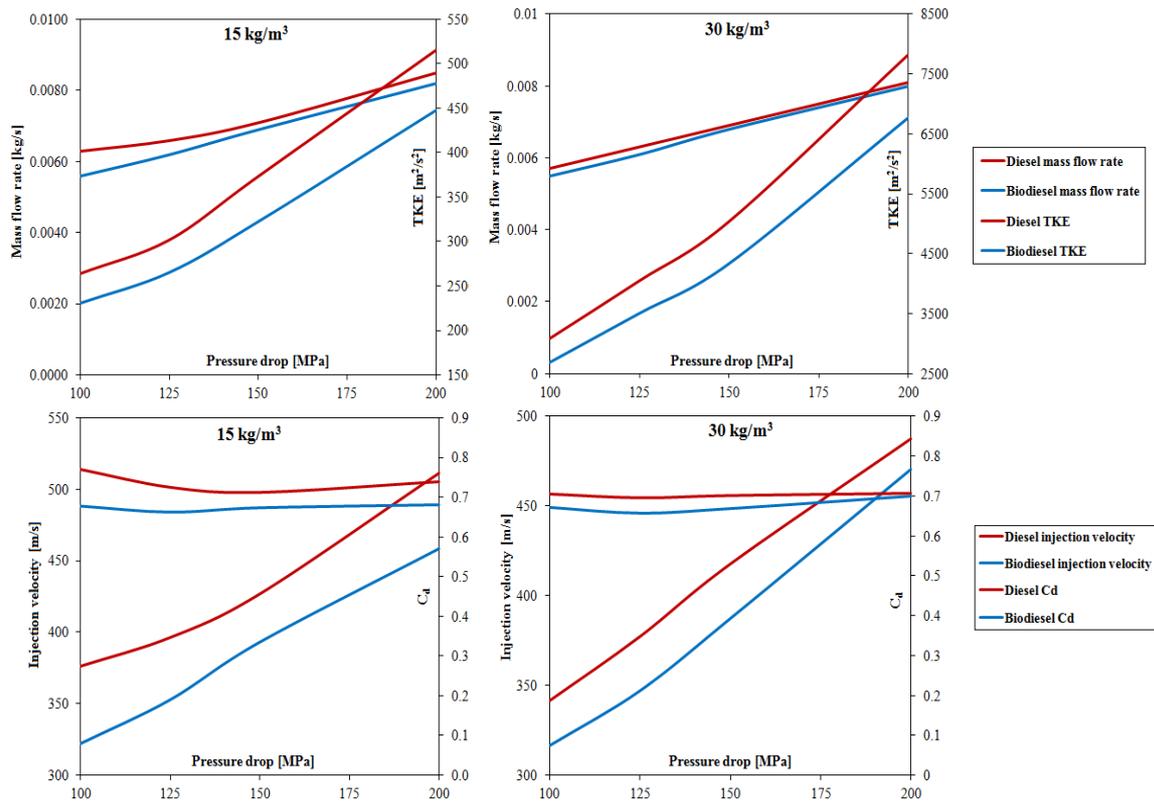


Figura 5.15 Portata in massa, TKE, velocità di iniezione e coefficiente di efflusso per densità ambiente a 15 kg/m³ e 30 kg/m³.

I risultati hanno quindi evidenziato come sia la velocità che la portata in massa crescano all'aumentare della pressione di iniezione, come riportato in Figura 5.15. Viceversa, come ci si potrebbe attendere, diminuiscono al crescere della pressione ambiente. Inoltre, i risultati hanno mostrato come la dipendenza dalla pressione ambiente renda via via meno rilevante le differenze tra i valori registrati per il biodiesel ed il gasolio e ciò ancor più per alte pressioni di iniezione.

Per quanto riguarda invece l'energia cinetica turbolenta, l'effetto della più alta viscosità del biodiesel porta ad avere un più basso valore del numero di Reynolds e quindi ad una diminuzione della TKE del 12-15%. Proprio per l'importanza che l'energia cinetica turbolenta riveste nella fase di break-up primario, a queste differenze ci si aspetta corrispondano delle differenze tra la morfologia dello spray ottenuto per iniezione di gasolio e quella del biodiesel.

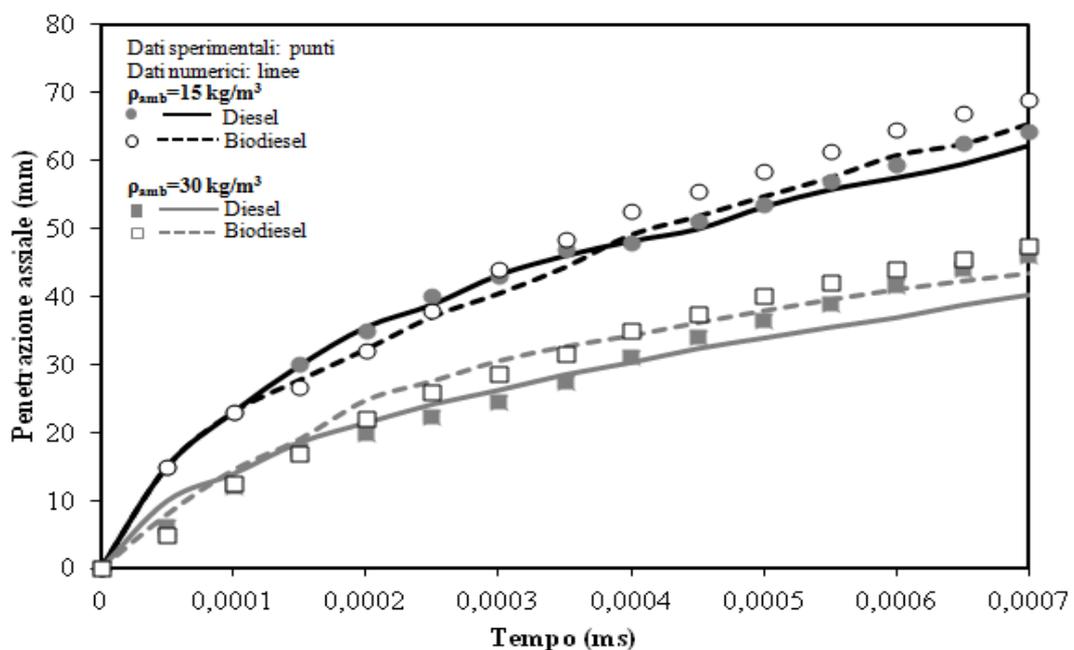
Per quanto riguarda le simulazioni dello spray si è quindi proceduto analizzando esclusivamente i casi di iniezione di diesel e biodiesel per le condizioni di pressione di iniezione di 100 MPa e 200 MPa e di densità dell'aria ambiente di 15 e 30 kg/m³, per un

tempo di iniezione di 0,7 ms, ciò in modo da poter avere informazioni più che sufficienti per confrontare i risultati delle simulazioni con i dati sperimentali in un intervallo tipico di iniezione nei motori a combustione interna. L'aver simulato solo le pressioni di iniezione estreme ha permesso di ridurre il numero di casi da analizzare senza però perdere la possibilità di trarre importanti conclusioni. Inoltre, per tali casi era possibile un confronto con valori sperimentali che permettesse di validare l'intero approccio utilizzato.

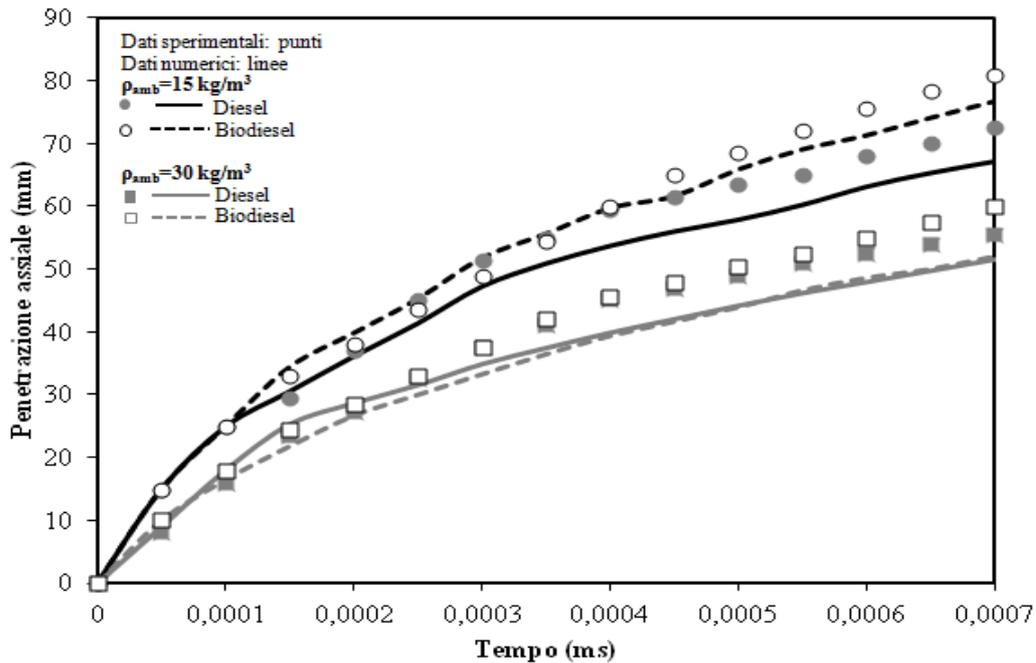
L'analisi è stata condotta su quella che è la morfologia e l'atomizzazione dello spray, cioè sui parametri che lo caratterizzano in modo completo come la penetrazione assiale, l'angolo di apertura e il diametro medio di Sauter.

5.7.1 La penetrazione assiale

Un primo confronto con i dati sperimentali è stato fatto sulla base della penetrazione assiale dello spray in funzione del tempo. I risultati hanno dimostrato come i valori ottenuti dalle simulazioni seguano perfettamente i rilievi sperimentali. Infatti, l'errore percentuale in corrispondenza dell'ultimo istante simulato (0,7 ms dopo l'inizio dell'iniezione) resta inferiore al 5% in ogni simulazione.



a) $P_{inj}=100 \text{ MPa}$



b) P_{inj}=200 MPa

Figura 5.16 Confronto tra i risultati sperimentali ed i dati numerici relativi alla penetrazione assiale per le diverse pressioni di iniezione: a) P_{inj}=100 MPa; b) P_{inj}=200 MPa.

L'approccio numerico adottato è risultato essere più che affidabile nel descrivere in modo preciso il comportamento dello spray al variare sia della pressione di iniezione sia della densità ambiente. Tuttavia, la descrizione numerica è risultata essere maggiormente sensibile alla densità ambiente rispetto a quanto evidenziato dai rilievi sperimentali.

Per quanto riguarda le differenze relative ai due combustibili, la penetrazione assiale è risultata essere maggiore per il biodiesel rispetto al gasolio. Questa è una conseguenza del complesso fenomeno fisico descritto nei precedenti paragrafi. La maggiore viscosità e tensione superficiale del biodiesel e la conseguente assenza del fenomeno della cavitazione così come la minore energia cinetica turbolenta nella sezione di uscita dell'iniettore hanno un effetto prevalente rispetto alla minore velocità del flusso di biodiesel rispetto al gasolio. Così a parità di tempo di iniezione la penetrazione assiale risulta maggiore per il biodiesel. Lo spray di quest'ultimo potrebbe in prima battuta sembrare più efficace proprio perché una maggiore penetrazione permette di occupare un maggiore spazio nella camera di combustione e penetrare maggiormente nel volume occupato dal comburente. Tuttavia, ciò avviene a discapito della polverizzazione del getto, come evidenziato anche dagli ulteriori parametri analizzati. Se ne può quindi

dedurre che il break-up dello spray di biodiesel avvenga con un certo ritardo. La distribuzione delle gocce quindi risulterà meno uniforme rispetto a quella del gasolio. Tale aspetto non è da trascurarsi in quanto, se la maggiore penetrazione assiale non è opportunamente studiata, potrebbe avere ricadute negative quali il presentarsi del fenomeno dell'impingement sulle pareti della camera di combustione o sul cielo del pistone. Fenomeno che porta alla formazione di depositi sulle pareti e quindi ad emissioni di incombusti e particolato maggiori oltre ad una minore efficienza della combustione anche in termini di potenza espressa.

Inoltre, è possibile notare come, nel caso di alta densità dell'aria ambiente (30 kg/m^3), le differenze tra la penetrazione assiale per iniezione di gasolio e biodiesel si riducano fino ad essere quasi trascurabili e questo avviene sia per i valori numerici che per quelli sperimentali. Si può dedurre che in queste condizioni la resistenza aerodinamica dell'aria prevalga sugli altri parametri riducendo l'effetto delle differenti proprietà fisiche dei combustibili considerati.

5.7.2 *L'angolo di apertura dello spray*

Un altro aspetto analizzato è stato l'angolo di apertura dello spray, parametro fondamentale per caratterizzarne la morfologia. In questo studio, l'angolo del cono associabile al getto è stato campionato al 60% della penetrazione massima in modo da avere un dato più preciso e depurato del possibile effetto della zona di dispersione (Figura 5.19).

Il modello numerico adottato è risultato più che valido anche rispetto a tale parametro. Infatti, le discrepanze rilevate tra l'angolo dello spray misurato sperimentalmente ed il valore ottenuto per le simulazioni numeriche risultano essere trascurabili nella maggior parte dei casi analizzati.

Dal punto di vista del comportamento fisico dello spray, alla luce di tale parametro, si è quindi potuto osservare come l'angolo di apertura sia pressoché insensibile alla variazione di pressione di iniezione nel range simulato, mentre l'aumento della densità dell'aria ambiente ha evidenziato un effetto di allargamento sull'angolo dello spray dovuto alla maggiore resistenza che lo spray trova nel penetrare assialmente.

Gasolio

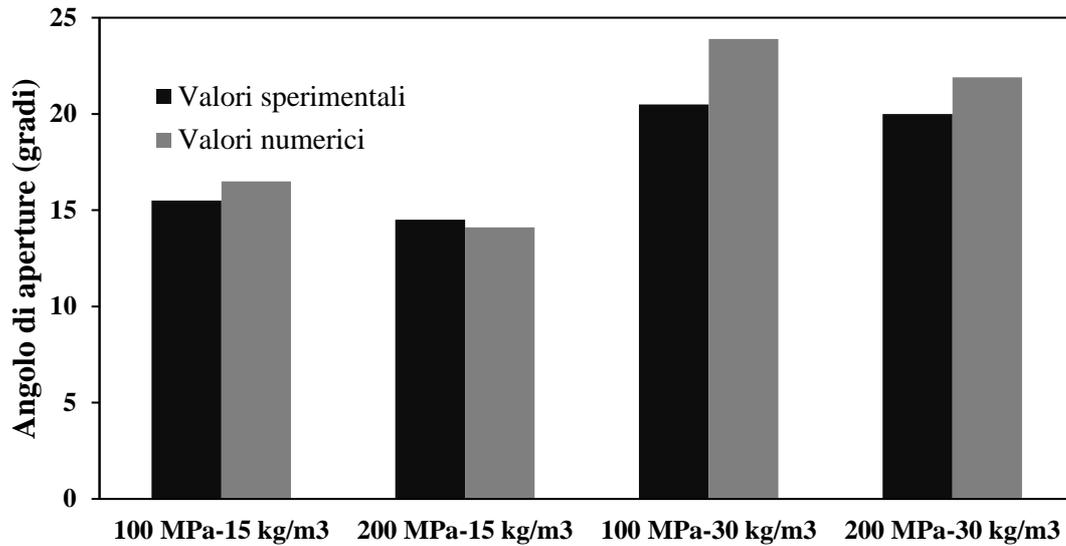


Figura 5.17 Valore dell'angolo di apertura del cono per il gasolio nei casi simulati.

Biodiesel

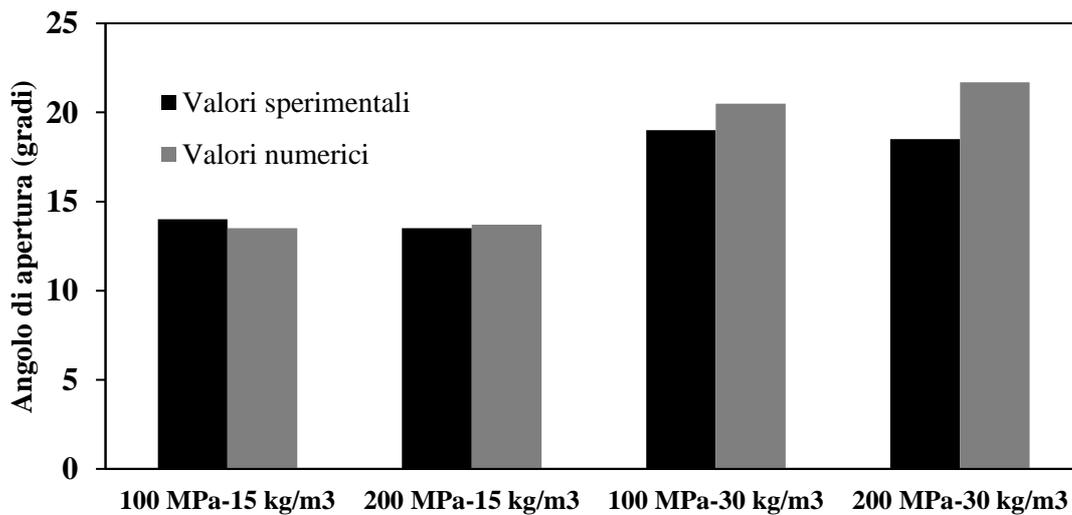


Figura 5.18 Valore dell'angolo di apertura del cono per il biodiesel nei casi simulati.

Dai risultati riportati è possibile notare come, a parità di condizioni operative, l'angolo di apertura del cono dello spray nel caso di iniezione di gasolio risulti maggiore di quello relativo all'iniezione di biodiesel. Tale differenza tra la morfologia dello spray dei due combustibili risulta evidente comparando la forma complessiva degli stessi tramite le foto sperimentali e le immagini ricavate dalle simulazioni numeriche. In particolare, in riferimento alle figure riportate per densità ambiente pari a 15 kg/m^3 e pressione di iniezione di 100 e 200 MPa, risulta evidente come la maggiore

viscosità e tensione superficiale del biodiesel porti ad una minore dispersione nelle direzioni ortogonali all'asse dello spray e quindi ad un minore angolo di apertura. Tutto ciò a conferma del fatto che nel biodiesel il fenomeno di atomizzazione risulti ritardato proprio per effetto dell'assenza della cavitazione e per la minore intensità della turbolenza, oltre che per l'effetto della maggiore viscosità.

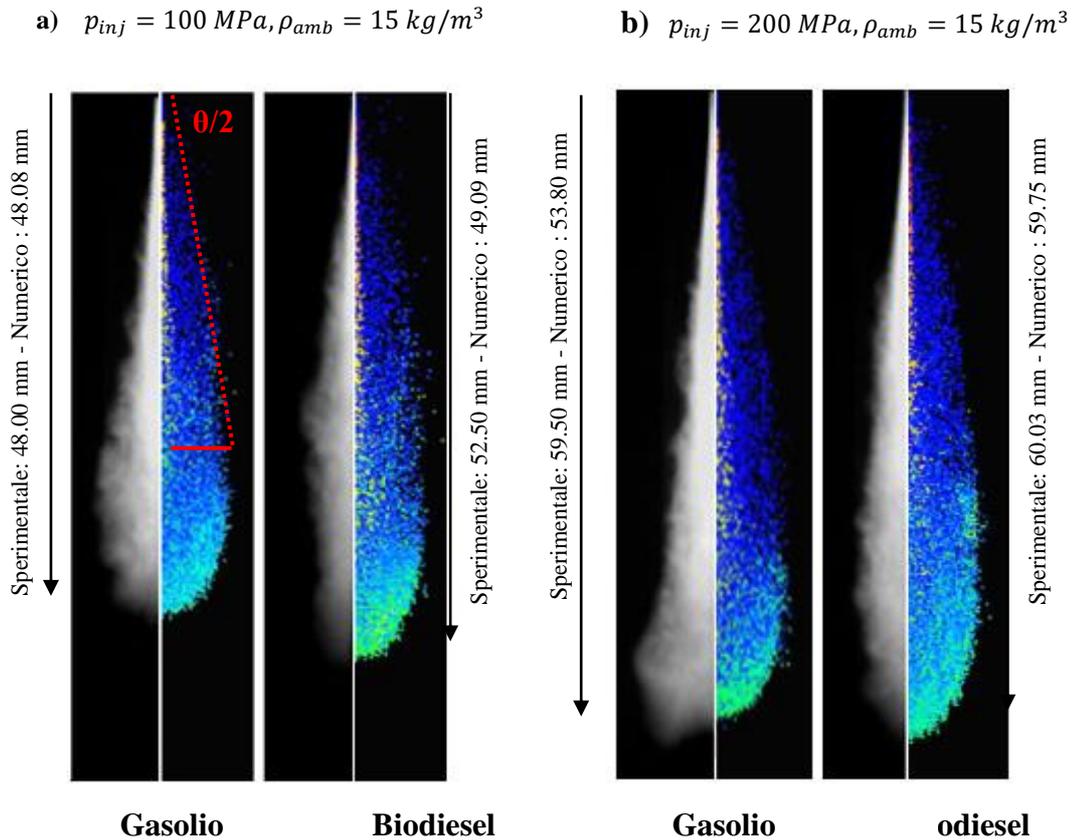


Figura 5.19 Confronto tra la forma dello spray risultante dalle simulazione e dalle misure sperimentali a diverse condizioni operative (0.4 ms after SOI): a) $p_{inj} = 100 \text{ MPa}, \rho_{amb} = 15 \text{ kg/m}^3$; b) $p_{inj} = 200 \text{ MPa}, \rho_{amb} = 30 \text{ kg/m}^3$.

Il confronto tra la forma dello spray risultante dalle simulazioni e dalle misure sperimentali a diverse condizioni operative ha comunque confermato la validità del modello adottato.

La maggiore compattezza evidenziata dallo spray del biodiesel può essere dimostrata analizzando l'interazione tra il gas ed il liquido che si manifestano nella zona di interfaccia dello spray in corrispondenza della regione di massima penetrazione assiale. Prendendo quindi in esame uno spray prodotto dall'iniezione di gasolio ed uno di biodiesel a condizioni operative che permettevano un confronto più immediato e diretto per via dei valori simili di penetrazione assiale (pressione di iniezione 100 MPa,

densità dell'aria 15 kg/m^3 , $0,4 \text{ ms}$ dopo l'inizio dell'iniezione) ed escludendo dalla rappresentazione le regioni aventi concentrazioni di fluido minori di 3 kg/m^3 in modo da rendere più intelligibile l'immagine, risulta evidente come lo spray di biodiesel sia caratterizzato da una maggiore concentrazione di liquido anche nella zona laterale dello spray.

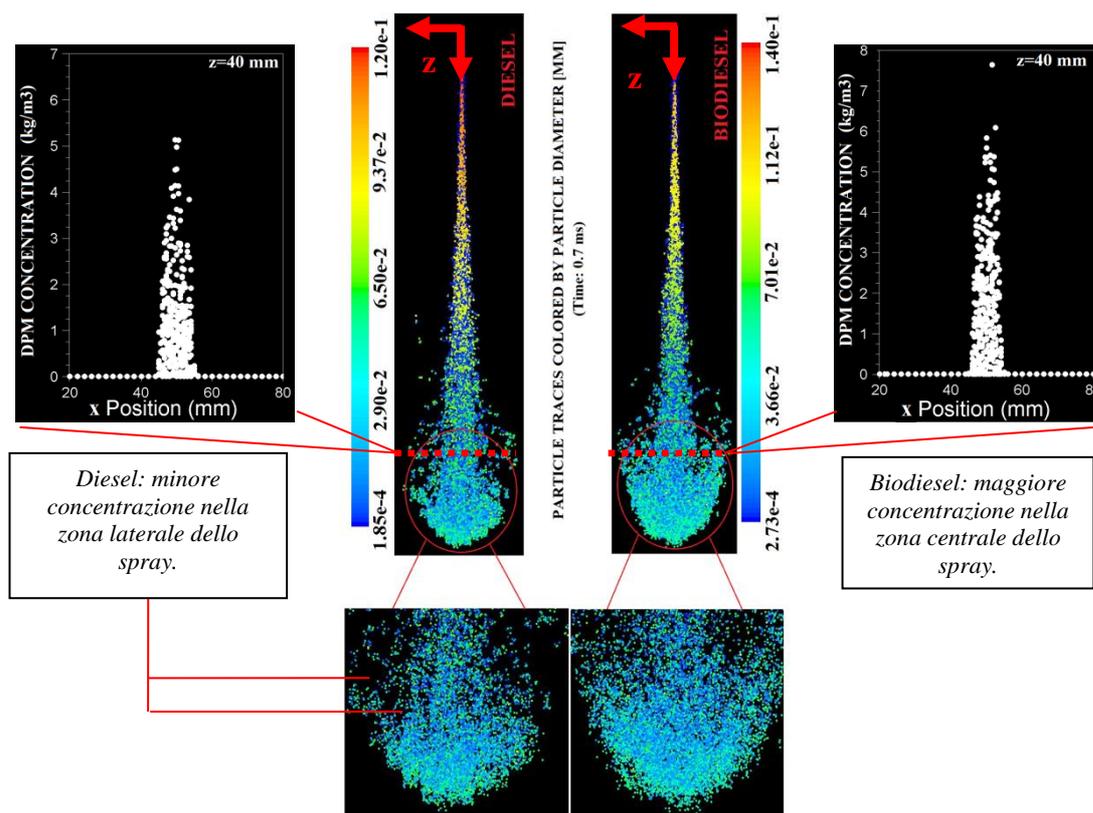


Figura 5.20 Interazione liquido-aria nella zona di massima penetrazione assiale ($p_{inj} = 100 \text{ MPa}$, $\rho_{amb} = 15 \text{ kg/m}^3$, istante: 0.4 ms).

5.7.3 Il diametro medio di Sauter

Si è infine investigato sulle differenze nell'atomizzazione dello spray nei casi simulati facendo riferimento al diametro medio di Sauter. Questo parametro risulta particolarmente importante in quanto permette di caratterizzare quelle che sono le dimensioni delle gocce risultanti dalle iniezioni con un unico valore e quindi rendere il confronto nelle varie condizioni operative per i diversi combustibili di immediata lettura.

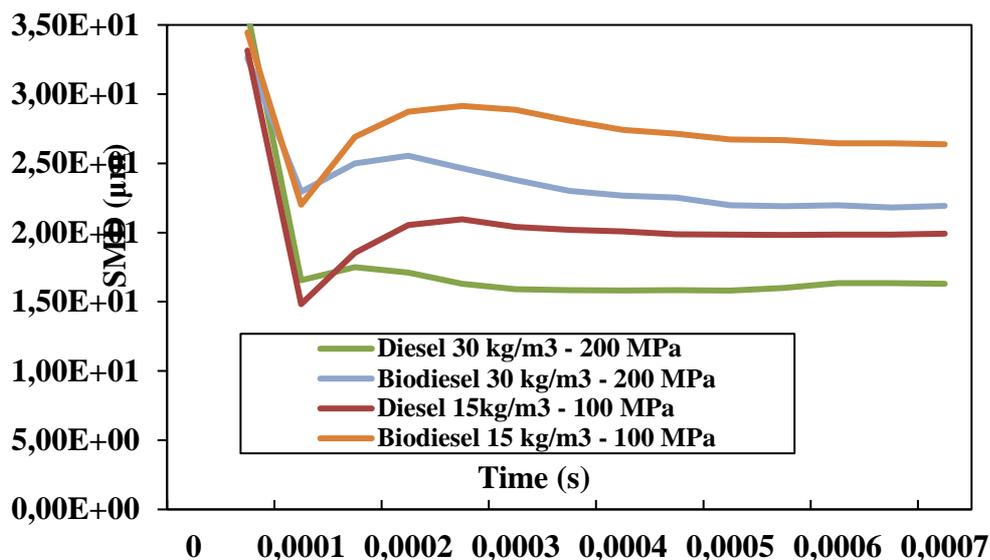


Figura 5.21 Evoluzione temporale del diametro medio di Sauter.

Dalla figura riportata, che mostra l'andamento nel tempo del diametro medio di Sauter per gasolio e biodiesel nelle diverse simulazioni investigate, risulta evidente come, a parità di condizioni operative, le gocce nel caso di spray di biodiesel abbiano dimensioni maggiori. Questo è una diretta conseguenza del ritardo nel break-up evidenziato in precedenza da tale biocarburante nei confronti del combustibile fossile dovuto proprio alle già menzionate differenze nelle proprietà fisiche. La combustione quindi, che avviene nella zona in cui si raggiunge un rapporto di miscela prossimo allo stechiometrico risulterà influenzata da ciò. L'obiettivo di avere uno spray che occupa il maggior volume possibile con gocce di diametro il più piccole possibile risulta quindi più complesso nel caso di alimentazione con biodiesel ed un utile compromesso può senz'altro essere l'adozione di miscele di biodiesel e gasolio in modo da attenuare tali differenze, limitando anche quelle che sono le problematiche collaterali.

In conclusione tutti i risultati numerici hanno mostrato un ottimo accordo con i dati sperimentali, ed hanno rivelato che le proprietà fisiche del combustibile svolgono un ruolo importante sull'atomizzazione dello spray. In particolare, è stato verificato che:

- la minore pressione di vapore per il biodiesel comporta che solo pochi millimetri dell'ugello dell'iniettore siano interessati da fenomeno della cavitazione. Questo è risultato essere uno svantaggio in termini di atomizzazione poiché, come noto, la cavitazione promuove il break up dello spray: da questo punto di vista, le differenze con il gasolio risultano via via crescere con l'aumentare della pressione di iniezione;

- la maggiore viscosità del biodiesel ha un duplice effetto. Innanzitutto, riduce la velocità di efflusso così che la portata in massa è risultata inferiore in confronto con il gasolio, anche se quest'ultima è caratterizzata da una diminuzione di densità dovuta alla estensione della cavitazione fino alla sezione finale dell'iniettore. In secondo luogo, porta ad una diminuzione dell'energia cinetica turbolenta: questo è un altro fattore che è risultato ritardare il break up.

Tali aspetti hanno quindi evidenziato il loro impatto sullo spray e sulla sua morfologia. Lo spray da diesel convenzionale è risultato essere caratterizzato da una minore penetrazione assiale, un angolo di apertura del cono più largo e da un diametro medio di Sauter minore, anche a causa di una tensione superficiale meno elevata. Ciò evidenzia le maggiori difficoltà che si trovano nella corretta atomizzazione del biodiesel ed incoraggia l'applicazione di pressioni di iniezione ultra-elevate in modo da facilitarne l'atomizzazione e superare gli attuali limiti. Alle pressioni di iniezione dei sistemi disponibili attualmente, per avere una corretta atomizzazione, risulta quindi ancora opportuno ricorrere a miscele gasolio-biodiesel.

Bibliografia

- [1] Som S., Ramirez A., Longman D.E., Aggarwal S.K., "Effect of nozzle orifice geometry on spray combustion and emission characteristics under diesel engine conditions", *Fuel* 90 (2011) 1267-1276.
- [2] Morgan R., Wray J., Kennaird D.A., Crua C., Heikal M.R., "The influence of injection parameters on the formation and break-up of a diesel spray", SAE Technical paper 2001-01-0529 (2001).
- [3] Payri R., Salvador F.J., Gimeno J., Zapata L.D., "Diesel nozzle geometry influence on spray liquid-phase fuel penetration in evaporative conditions", *Fuel* 87 (2008) 1165-1176.
- [4] Yuan W., Schnerr G.H. "Numerical simulation of two-phase flow in injection nozzle: interaction of cavitation and external jet formation", *Journal of fluid engineering* 125(2003) 963-969.
- [5] Im K.S., Cheong S.K., Powell C.F., Liu X., Wang J. "Effect of internal cavitation on break-up of high pressure diesel spray", 11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, Colorado USA, July 2009.
- [6] Park S.H., Suh H.K., Lee C.S. "Effect of cavitating flow on the flow and fuel atomization characteristics of biodiesel and diesel fuels", *Energy and fuels* 22 (2008) 605-613.
- [7] Salvador F.J., Martinez-Lopez J., Romero J.V., Rosellò M.D., "Study of the influence of the needle eccentricity on the internal flow in diesel injector nozzle", *International journal of computer mathematics* (2013) in-press.
- [8] Wang X., Huang Z., Kuti O. A., Zhang W., Nishida K., "Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra high injection pressure", *International Journal of heat and fluid flow* 31 (2010).
- [9] He C., Ge Y., Tan J., Han X., "Spray properties of alternative fuels: a comparative analysis of biodiesel and diesel", *International Journal of energy research* 32 (2008).
- [10] Ubertini S., "Motori diesel ad iniezione diretta. Alimentazione del combustibile e moto della carica", *Dispense del corso di motori a combustione interna*.
- [11] Som S., Longman D.E., Ramirez A.I., Aggarwal S.K., "A comparison of injector flow and spray characteristics of biodiesel with petrodiesel", *Fuel* 89 (2010) 4014-4024.
- [12] Singhal A.K., Athavale A.K., Li H., Jiang Y., "Mathematical basis and validation of the full cavitation model", *Journal of Fluid Engineering* 124 (2002) 617-625.
- [13] E.C. Brenner. "Cavitation and bubble dynamics", 1995, Oxford University Press.
- [14] Reitz R.D., "Mechanism of atomization processes in high-pressure vaporizing sprays", *Atomization and spray technology*, 3 (1987).
- [15] Stolica R., "Studio della formazione di uno spray di combustibile in camere di combustione a bassa pressione".
- [16] Liu A.B., Mather D., Reitz R.D., "Modeling the effect of drop drag and break-up on fuel sprays", SAE Technical paper 930072 (1993).

[17] Schmidt D.P., Corradini M.L., "Analytical prediction of the exit flow of cavitating orifices", *Atomization and sprays* 6 (1997).

6 Simulazioni HCCI

6.1 Introduzione

Oggi giorno, i motori a benzina e i diesel coprono la totalità del trasporto di terra. In termini di emissioni, il primo è caratterizzato da una maggior produzione di monossido di carbonio (CO) e idrocarburi incombusti o parzialmente combustibili (HC) rispetto ai motori diesel [1-2]. Tuttavia, gli ossidi di azoto (NO_x) e il particolato (Particulate matter PM), rappresentano le principali emissioni inquinanti dei motori diesel, che richiedono adeguate strategie per il loro controllo [3]. Il loro impatto sulla salute e l'ambiente hanno promosso vincoli normativi sempre più stringenti considerando anche l'aumento della quota di mercato di veicoli diesel negli ultimi anni, grazie alla loro più alta efficienza termica e al loro minore consumo di combustibile. Per esempio, in Europa, la norma sulle emissioni EURO VI di prossima attuazione, dovrebbe ulteriormente abbassare i limiti alle emissioni rispetto all'attuale EURO V [4]. Per raggiungere questi requisiti, i dispositivi di post-trattamento devono essere accompagnati da attività di ricerca incentrata sull'ottimizzazione della combustione.

Focalizzando l'attenzione sui motori diesel ad iniezione diretta (Direct Injection DI), l'*Homogeneous Charge Compression Ignition* (HCCI) è uno dei progressi più promettenti per ridurre contemporaneamente NO_x e PM, mantenendo elevate prestazioni del motore, almeno per valori bassi o medi del carico oltre che per bassi regimi di rotazione. Il motore HCCI è simile a un motore ad accensione comandata con scintilla in cui il combustibile e l'aria vengono mescolati prima che la combustione inizi, ma al tempo stesso l'autoaccensione della carica per compressione del pistone garantisce un comportamento simile al diesel. In questo modo la combustione HCCI può realizzare una combinazione delle migliori caratteristiche di entrambi i motori diesel e benzina, quali emissioni del benzina esenti da emissioni di fuliggine ed una efficienza pari a quella del diesel [5-6]. La riduzione delle emissioni inquinanti è ottenuta aumentando l'omogeneità della carica: questo permette di ottenere che l'alta temperatura del fronte di fiamma sia abbassata e che quindi la formazione di NO_x sia limitata. Allo stesso modo, la miscela magra omogeneizzata riduce il rapporto di equivalenza locale e quindi il tasso di formazione di fuliggine [7]. Poiché l'omogeneità

della carica gioca un ruolo fondamentale, i fenomeni di iniezione e, specificamente, i tempi di iniezione rappresentano aspetti cruciali per studiare la combustione HCCI.

Le strategie più comuni sono le iniezioni anticipate e ritardate di carburante. Durante l'iniezione il carburante viene iniettato in anticipo durante la fase di compressione per garantire un sufficiente tempo di miscelazione con l'aria. La PREDIC [8-9] e la UNIBUS [10] sono le iniziative più significative riguardo l'anticipo dell'iniezione diretta nella combustione HCCI. Il modello PREDIC utilizza tre diversi iniettori (due iniettori su entrambi i lati del cilindro ed uno al centro) per minimizzare la bagnatura della parete che si verifica quando il combustibile viene introdotto all'interno del cilindro molto prima del punto morto superiore (PMS) e per poter controllare il tempo di iniezione e la quantità di combustibile immessa. Dati sperimentali mostrano un basso valore di NO_x e di concentrazioni di fumo, anche se più elevate emissioni di HC e di consumo del carburante. Il motore UNIBUS impiega una combinazione tra un'iniezione anticipata e una ritardata con diverse quantità di carburante associati ad ogni impulso. L'effetto dei tempi di iniezione e dei livelli molto elevati di EGR è stato studiato per capire la loro influenza sul ritardo all'accensione (Ignition Delay, ID). I risultati mostrano un valore di particolato trascurabile, così come le emissioni di NO_x , rispetto ai motori diesel convenzionali.

Quando si utilizzano iniezioni ritardate, specialmente in combinazione con alte percentuali di EGR, l>ID può essere aumentato a causa della rapida diminuzione della temperatura e della densità dei gas durante la fase di espansione: questo porta ad un miglioramento della formazione della miscela e la riduzione del picco del tasso di rilascio di calore. Il sistema di combustione Modulated Kinetic (MK) sviluppato da Nissan Motors rappresenta un esempio di questa strategia [11-12]. Qui, l>ID viene esteso utilizzando livelli di EGR che riducono la concentrazione di ossigeno del 15-16% e ritardando l'iniezione da 7 gradi di angolo di manovella (Crank Angle CA) prima del punto morto superiore (Before Top Death Center BTDC) a 3 gradi dopo il punto morto superiore (After Top Death Center ATDC): le emissioni di NO_x sono state ridotte fino a 50 ppm, senza un aumento del particolato.

Il controllo del tempo di iniezione non è l'unico parametro che deve essere preso in considerazione per la realizzazione di un regime di combustione HCCI. La riduzione del rapporto di compressione porta a prolungare il ritardo all'accensione consentendo

una migliore distribuzione del carburante all'interno del cilindro [13]. Inoltre, quando il rapporto di compressione viene ridotto, la detonazione può essere impedita così come la combustione esplosiva [14]. Questa strategia è stata utilizzata anche in una versione migliorata del motore diesel MK per raggiungere condizioni di carico superiori ed estendere la combustione a bassa temperatura. Allo stesso modo, il design e la forma del bowl è un altro fattore importante che deve essere considerato, soprattutto quando precoci iniezioni vengono adottate in combinazione con angoli di spray ristretti per evitare l'impatto del combustibile contro la parete del pistone (impingement) [15-16].

In termini generali, la gestione di qualsiasi parametro del motore (ad esempio la pressione di iniezione, la temperatura della carica in aspirazione, il rapporto di compressione, etc) può essere rivista e modificata per estendere il ritardo all'accensione e consentire al carburante iniettato di avere il tempo per creare una distribuzione più omogenea a valori elevati del carico. Per esempio, le più recenti ricerche si concentrano sulla modifica del carburante per abbinare il suo numero di cetano (Cetane Number CN) con i requisiti della combustione HCCI: i combustibili con alti CN sono utilizzati a causa della loro temperatura di autoaccensione inferiore, così come i combustibili alternativi o gli additivi supplementari che possono essere aggiunti a formare una miscela [17-18].

Nel presente Capitolo sono illustrate le indagini fatte sulle prestazioni di un motore diesel automobilistico leggero ad iniezione diretta DI che lavora sotto condizioni HCCI attraverso simulazioni numeriche CFD. L'attenzione è stata focalizzata principalmente sul consumo di carburante del motore e la formazione degli NO_x adottando diverse strategie di iniezione: una singola iniezione precoce e successivamente una doppia iniezione consistente in uno spray precoce nella fase di compressione e una seconda iniezione ritardata rispetto al punto morto superiore.

Per le simulazioni di fluidodinamica computazionale di motori a combustione interna, i modelli di spray del carburante sono stati accompagnati dallo sviluppo di meccanismi cinetici utili a determinare il processo di combustione. In termini generali, l'applicazione di cinetiche chimiche di ossidazione del diesel è limitata ai meccanismi scheletrici o ridotti che possono essere ottenuti a partire da una chimica dettagliata: l'uso di surrogati specifici rende questi codici compatibili con i software CFD, riducendo il loro sforzo computazionale [4-7]. Molti ricercatori si sono concentrati in particolare sul

ritardo all'accensione e sulla concentrazione delle specie per validare il meccanismo ridotto con i dati sperimentali. Molti altri hanno sfruttato questi meccanismi ridotti validati per avere dei risultati attendibili nel momento in cui andavano a effettuare delle simulazioni sui motori. In particolare, in questo lavoro si è utilizzato un meccanismo ridotto per poter avere dei risultati veritieri e confrontabili in maniera più precisa con i dati sperimentali.

6.2 *Modello computazionale*

In questo paragrafo saranno descritti i principali modelli matematici utilizzati nelle varie simulazioni sia per quanto riguarda la cinetica della combustione che il calcolo delle emissioni inquinanti. Per quanto riguarda la tipologia di iniettore e il modello di break-up dello spray del combustibile, ci si è affidati al plain orifice e al WAVE break-up utilizzati nelle simulazioni dello spray a freddo, quindi si ometterà la loro trattazione matematica, dato che essa è già stata riportata nel capitolo precedente.

6.2.1 *Il modello della combustione*

Gli effetti della turbolenza sono stati modellati attraverso l'approccio LES-*Smagorinsky-Lilly*. In confronto con altri metodi di chiusura, la LES assicura una migliore performance nella descrizione di questo tipo di problemi: la sua capacità di seguire molto bene la turbolenza e le fluttuazioni nelle variazioni delle varie grandezze implica che le emissioni di inquinanti possono essere stimate con un livello di precisione più accurata.

Per la combustione è invece stato utilizzato un meccanismo ridotto, composto da 29 specie e 52 reazioni sviluppate dall'*Engine Research Center (ERC)* [19] (i dettagli del codice sono stati riportati in *Appendice A*). Tale modello cinetico si adatta perfettamente alle simulazioni CFD dato che è costituito da un ridotto numero di specie chimiche. Allo stesso tempo, la sua validazione mediante dati sperimentali assicura una elevata affidabilità in condizioni di combustione HCCI.

Il meccanismo chimico è stato utilizzato tramite il modello *Diesel Unsteady Flamelet* attraverso cui la creazione di look-up tables nel calcolo delle flamelets viene eseguita ad ogni passo temporale e non solo in una fase di pre-elaborazione come in altri modelli di combustione non premiscelati.

Utilizzando l'approccio delle flamelet, le equazioni per la frazione in massa delle specie, l'equazione dell'energia così come anche la cinetica chimica, possono essere "traslate" da uno spazio fisico a uno spazio funzione della frazione di miscela e dello *strain rate* χ . Tale approccio permette la scrittura delle equazioni nello spazio Z - χ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + S_i \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \rho \frac{\chi}{2 c_p} \frac{\partial T}{\partial Z} \frac{\partial c_p}{\partial Z} - \sum_i^N \rho \frac{\chi}{2 L e_i} \frac{c_{p,i}}{c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{1}{c_p} \sum_i^N S_i h_i - \frac{1}{c_p} \frac{\partial p}{\partial t} = 0 \quad (2)$$

dove Y_i , T , ρ , Z , S_i e h_i rappresentano la frazione in massa, la temperatura, la densità, la frazione di miscela, la velocità di reazione e l'entalpia della i -esima specie rispettivamente; $c_{p,i}$ e c_p sono i calori specifici della i -esima specie e della miscela. L'ultimo addendo della seconda equazione tiene conto dell'aumento di temperatura durante la compressione che porta all'accensione della miscela: p è la pressione mediata nel volume all'interno del cilindro.

In condizioni stechiometriche, χ e Z sono relazionate secondo la seguente equazione:

$$\chi_{st} = \frac{a_s \exp\{-2[erfc^{-1}(2Z_{st})]^2\}}{\pi} \quad (3)$$

dove a_s è una costante del modello, Z_{st} e χ_{st} si riferiscono alle condizioni stechiometriche, $erfc$ è la funzione inversa dell'errore. Nella fiamma turbolenta, sia Z che χ_{st} sono variabili random con una annessa funzione densità di probabilità (*Probability Density Function, PDF*). Quindi, le caratteristiche scalari (quali densità, temperatura e frazione in massa) nella fiamma turbolenta possono essere ottenute con una flamelet statisticamente laminare:

$$\bar{\phi} = \iint \phi(Z, \chi_{st}) p(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (4)$$

Assumendo che Z e χ_{st} abbiano distribuzioni indipendenti, l'equazione di può scrivere come:

$$\bar{\phi} = \iint \phi(Z, \chi_{st}) p_Z(Z) p_\chi(\chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (5)$$

Le prime due equazioni per la frazione in massa delle specie chimiche e per la temperatura sono risolte simultaneamente con il flusso: le equazioni della flamelet sono calcolate per uno step temporale usando proprietà calcolate dal flusso e successivamente

quest'ultimo è calcolato per lo stesso step temporale usando le proprietà della flamelet (Figura 6.1). Il time step della flamelet è calcolato in funzione della dissipazione, della pressione e delle temperature di combustibile e ossidante, mediati nel volume che sono passate dal solutore del flusso al solutore della flamelet.

Per chiudere il sistema di equazioni, nella LES viene risolta la seguente equazione risolta per la frazione di miscela media nello spazio fisico:

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j Z) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) + S_m \quad (6)$$

dove il termine sorgente S_m è dovuto al trasporto di massa nella fase gassosa dalla fase liquida del combustibile in gocce e μ_t è la viscosità della scala di sotto-griglia. La seguente equazione è risolta per la varianza della frazione di miscela:

$$Z'^2 = C_{var} L_{var}^2 \left| \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right|^2 \quad (7)$$

con C_{var} una costante fissata a 0.5 e L_{var} la lunghezza della scala di sotto-griglia.

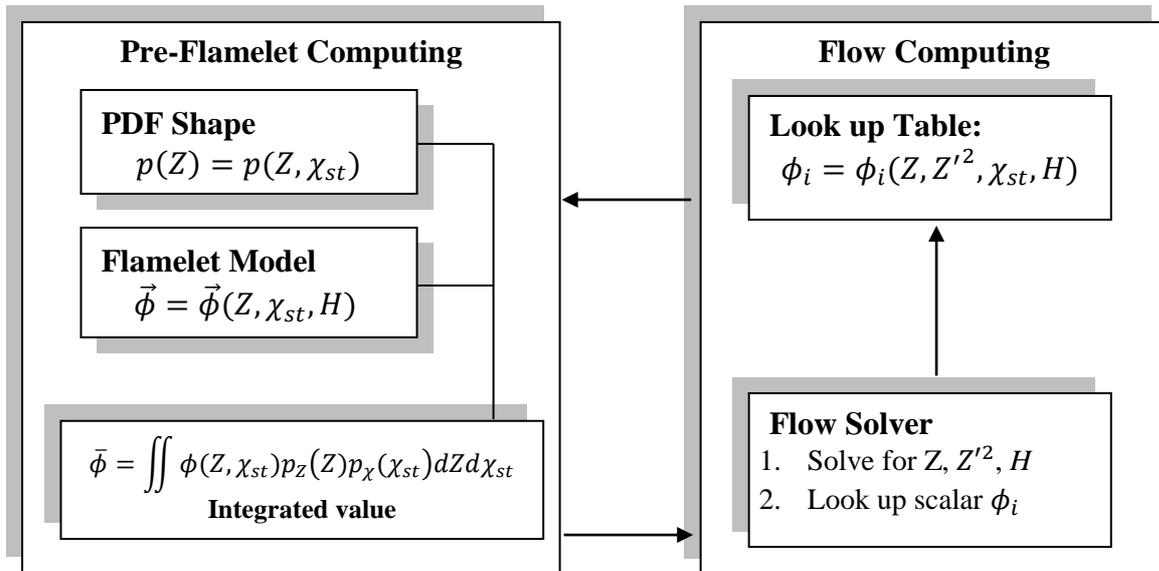


Figura 6.1 Calcolo del modello Flamelet.

6.2.2 Modelli per calcolo delle emissioni inquinanti

6.2.2.1 NO_x

Un approccio innovativo è stato adottato per il calcolo delle emissioni di NO_x . L'attenzione è stata limitata alla produzione degli NO termici in quanto è stato verificato che i contributi di N_2O e dei prompt- NO_x possono essere trascurati. La maggior parte

dei software di solito calcolano le emissioni di NO_x utilizzando delle correlazioni pre-impostate per la stima delle concentrazioni delle specie chimiche più importanti, come O e OH, a seconda del metodo scelto (ad esempio di equilibrio, equilibrio parziale o approccio istantaneo). Questi metodi “statici” possono però non garantire una corrispondenza con l'evoluzione della combustione nel cilindro portando ad alti discrepanze nel confronto con evidenze sperimentali. Nel presente lavoro, è stato replicato il meccanismo di Zeldovich all'interno di una User Defined Function che è stata direttamente collegata al meccanismo di combustione (Figura 6.2).

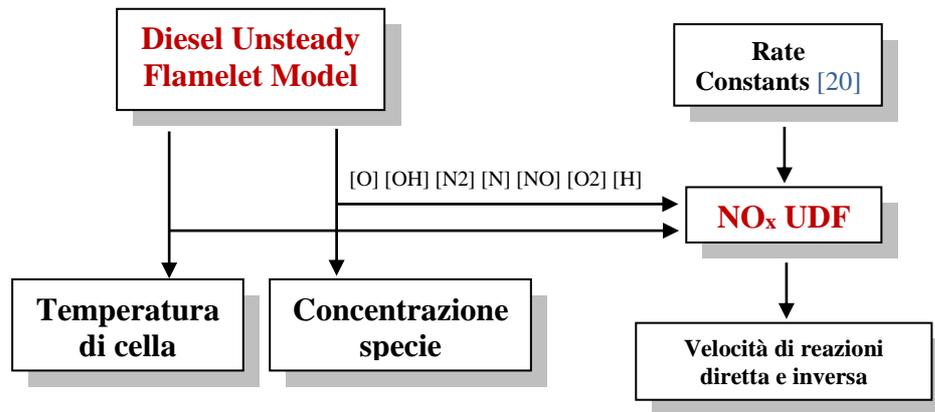


Figura 6.2 Schema di interazione tra il modello di combustione e la UDF per il calcolo NO_x.

Questo codice legge la temperatura e la concentrazione delle specie in ogni cella e utilizza questi valori per calcolare le velocità di reazione diretta ed inversa degli NO durante la combustione. Questo metodo ha il vantaggio di stimare le emissioni di NO in funzione della concentrazione effettiva delle specie e di seguire perfettamente l'evoluzione dei processi di combustione. Il codice è presentato in *Appendice B*.

6.2.2.2 Particolato

La produzione netta di fuliggine deve essere calcolata tenendo conto sia del suo tasso di formazione che del suo tasso di ossidazione. In questo studio è stato adottato il modello Moss-Brookes [21]: la frazione di massa di particolato (Y_{soot}) e la densità del numero di particelle di fuliggine (N) possono essere calcolati risolvendo le relative equazioni di trasporto:

$$\frac{\partial(\rho Y_{soot})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v Y_{soot}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{soot}} \frac{\partial Y_{soot}}{\partial x_i} \right) + \frac{dM}{dt} \quad (8)$$

$$\frac{\partial(\rho b_{nuclei}^*)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v b_{nuclei}^*) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_{nuclei}} \frac{\partial b_{nuclei}^*}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{N_{norm}} \frac{dN}{dt} \quad (9)$$

con $N_{norm} = 10^{15}$ particelle, $b_{nuclei}^* = N/(\rho N_{norm})$.

La concentrazione in massa del particolato M e la densità del numero di particelle N che compaiono nelle precedenti equazioni possono essere calcolate come:

$$\frac{dN}{dt} = C_\alpha N_A \left(\frac{X_{prec} p}{RT} \right)^l \exp\left(-\frac{T_\alpha}{T}\right) - C_\beta \left(\frac{24 RT}{\rho_{soot} N_A} \right)^{0.5} d_p^{0.5} N^2 \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} = & C_\alpha M_p \left(\frac{X_{prec} p}{RT} \right)^l \exp\left(-\frac{T_\alpha}{T}\right) + C_\gamma \left(\frac{X_{sgs} p}{RT} \right)^m \exp\left(-\frac{T_\gamma}{T}\right) \left[(\pi N)^{1/3} \left(\frac{6M}{\rho_{soot}} \right)^{2/3} \right]^n \\ & - C_{ox} C_\omega \eta_{coll} \frac{X_{OHP} p}{RT} T^{0.5} (\pi N)^{0.3} \left(\frac{6M}{\rho_{soot}} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (11) \end{aligned}$$

Nella prima equazione, il primo addendo rappresenta la nucleazione e il secondo l'accrescimento, con d_p il diametro medio delle particelle di particolato e X_{prec} la frazione molare dei precursori del particolato (acetilene e benzene). Nella seconda equazione, i tre addendi rappresentano la nucleazione, la crescita della superficie e la velocità di ossidazione, rispettivamente [21]. Per quanto riguarda le costanti del modello, la seguente Tabella 6.1 ne specifica il significato e ne riporta il valore.

Costante	Valori	Funzione
C_α	54 s^{-1}	Costante del tasso di formazione
T_α	21.000 K	Temperatura di attivazione di formazione del particolato
C_β	1	Costante del tasso di coagulazione
C_γ	$11.700 \text{ kg m kmol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	Fattore di scala del tasso di crescita superficiale
T_γ	12.100 K	Temperature di attivazione della crescita superficiale
C_ω	$105.812 \text{ kg m kmol}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1/2}$	Costante di ossidazione
η_{coll}	0.04	Parametro di efficienza alla collisione
C_{oxid}	0.015	Parametro di scala del tasso di ossidazione

Tabella 6.8 Costanti per il modello di calcolo delle emissioni di particolato.

6.3 Specifiche del motore

L'approccio numerico è stato innanzitutto validato sulla base di dati sperimentali [22] e in Figura 6.3 è mostrato un diagramma schematico dell'intero sistema di acquisizione di questi. L'apparato sperimentale che comprende il motore diesel light-duty, è composto da un dinamometro e dal relativo controllo, dal sistema di iniezione del combustibile, di misurazione delle prestazioni di potenza e dall'analizzatore di gas di scarico.

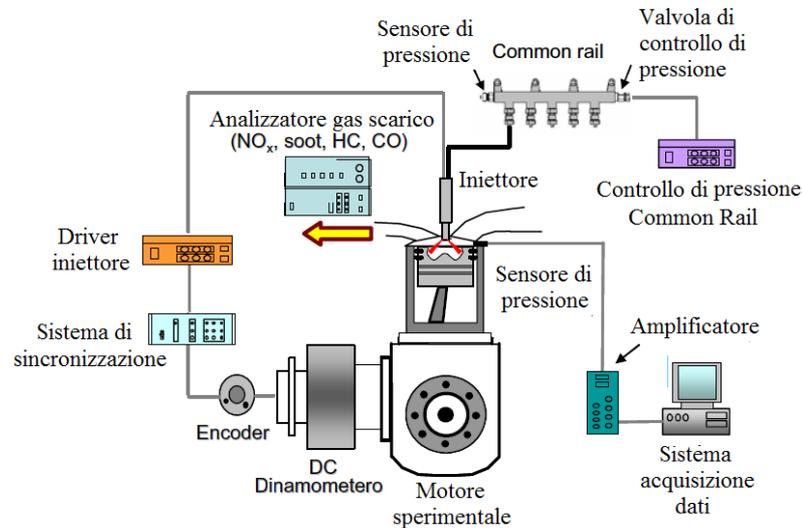


Figura 6.3 Sistema di acquisizione dei dati sperimentali.

I dati sperimentali presentati sono stati ottenuti da un motore diesel ad iniezione diretta costituito da un unico cilindro, avente una cilindrata pari a 373 cm^3 . Il motore è stato equipaggiato con un sistema di iniezione common-rail con una pressione di iniezione massima di 150 MPa. Le specifiche di base sono elencate nella Tabella 6.2.

Tipo di motore	Motore diesel ad iniezione diretta
Alesaggio x corsa	75 mm x 84.5 mm
Rapporto di compressione	15.1
Cilindrata	373 cm^3
Valvole per cilindro	4
Velocità del motore	1,500 rpm
Pressione nel condotto di aspirazione	0.1 MPa (naturalmente aspirato)
EGR	0%
Timing di apertura e chiusura valvole	

IVO/IVC	8° BTDC/52° ABDC
EVO/EVC	8° BBDC/38° ATDC

Tabella 6.9 Specifiche del motore.

L'avviamento del motore è stato compiuto attraverso un dinamometro DC con 55 kW di potenza frenante massima. I parametri di iniezione del carburante, compresa la pressione di iniezione, il tempo di iniezione e la sua durata sono controllate da un generatore di impulsi di temporizzazione e un driver di iniezione universale (TDA-3200, TEMS). Un encoder angolare ottico permette la sincronizzazione del tempo di iniezione con una risoluzione di 0,1 gradi di rotazione dell'albero a gomiti. La misura dei componenti dei gas di scarico dal motore è stata condotta da un analizzatore di NO_x e fuliggine. La pressione nel cilindro è misurata tramite un sensore piezoelettrico (6052B1, Kistler) accoppiato ad un amplificatore di carica (5011B, Kistler).

In Figura 6.4 è riportata la sezione trasversale della camera di combustione. L'impiego di un getto a cono stretto con tecnologia NADI (Narrow Angle Direct Injection) e la forma del pistone garantiscono che lo spray non manchi il bowl del pistone nel caso di tempi di iniezione anticipati. Il rapporto di compressione è stato ridotto in confronto ai valori tipici di motori diesel leggeri, per evitare che avvenga l'accensione prematura della carica e permettere la omogeneizzazione della stessa senza che si abbia un anticipo marcato dell'auto ignizione.

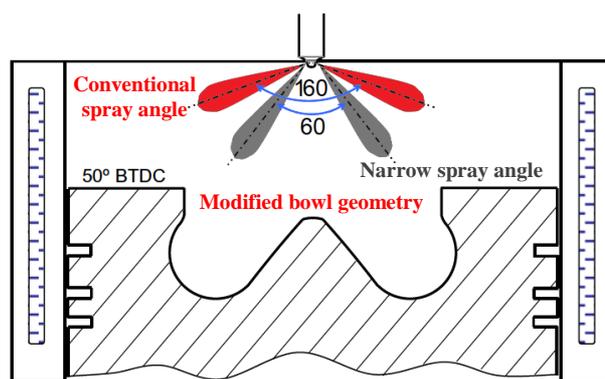


Figura 6.4 Sezione trasversale della camera di combustione.

Il sistema di erogazione di combustibile è un common rail a controllo elettronico le cui specifiche sono state riportate in Tabella 6.3. Tutte le simulazioni sono state condotte per una pressione di iniezione pari a 100 MPa, con una quantità di carburante iniettato pari a 8 mg e regime motore di 1.500 giri al minuto.

Tabella 6.10 Caratteristiche del sistema di iniezione.

Sistema di iniezione	Common rail
Pressione di iniezione	100 MPa
Numero di ugelli	6
Diametro dei fori degli ugelli	0.126 mm
Massa di combustibile iniettata	8 mg/stroke
Durata dell'iniezione	5 CA (Crank Angle)
Angolo compreso tra spray	60°

6.4 Specifiche della griglia di calcolo utilizzata

Poiché la posizione dei sei ugelli dell'iniettore è simmetrica e l'iniettore è posto al centro della camera di combustione e del bowl della testa del pistone, le simulazioni sono state effettuate su un settore di 60°, ponendo la continuità del flusso sulle facce laterali del settore. L'attenzione è stata focalizzata sul flusso nel cilindro e sui fenomeni di combustione. Quindi, le simulazioni iniziano alla chiusura della valvola di aspirazione (*Inlet Valve Close, IVC*) e terminano alla apertura della valvola di scarico (*Exhaust Valve Open, EVO*). La griglia è costituita da celle strutturate, in numero pari a 28.830 al punto morto superiore (Figura 6.5) e 176.880 all'EVO: tale densità è in grado di garantire risultati indipendenti dalla griglia stessa. Infatti, quando si è al punto morto superiore, il volume della camera di combustione è di soli 26 cm³ e tale numero di celle, assicura una dimensione media della cella di 0,15 mm³. Inoltre è stata utilizzata la tecnica della stratificazione (Figura 6.6) per la rimozione e l'aggiunta di strati di celle rispettivamente durante la fase di compressione e quella di espansione [21].

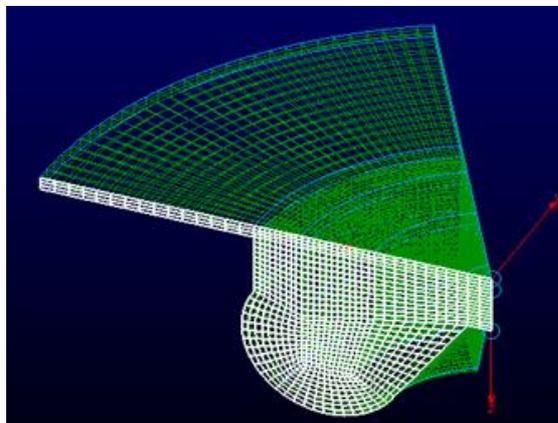


Figura 6.5 Mesh della camera di combustione al PMS.

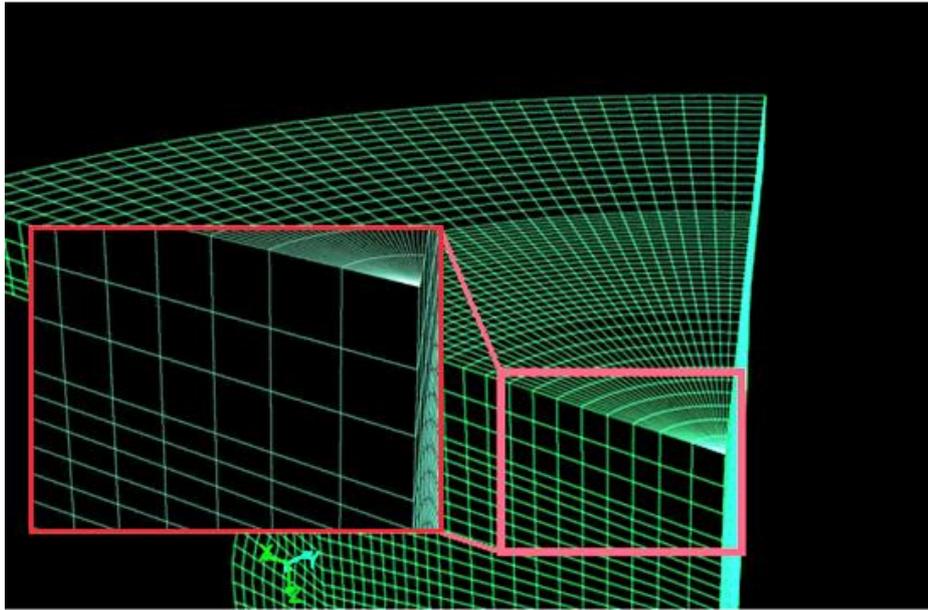


Figura 6.6 Tecnica della stratificazione.

Infine, è stata impiegata una UDF per inizializzare il campo di flusso all'inizio della simulazione, ovvero all'IVC, e prendere in considerazione l'effetto della corsa di aspirazione. In particolare, è stato fissato un numero per lo swirl ratio pari a 2 che è congruente con la velocità di regime del motore (Figura 6.7). Lo step temporale della simulazione è di $2.778 \cdot 10^{-5}$ secondi che corrisponde a 0,25 gradi dell'angolo di manovella.

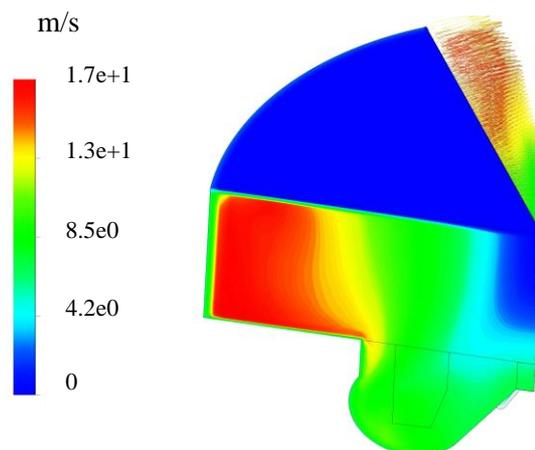


Figura 6.7 Moto dell'aria per effetto dello swirl.

6.5 *Risultati*

In questo paragrafo saranno illustrati i risultati ottenuti per tutte le serie di simulazioni affrontate, prima per validare il modello utilizzato, poi per indagare appieno le proprietà e le caratteristiche della combustione HCCI imponendo strategie di iniezione per l'abbattimento delle emissioni. Verranno illustrate le differenze tra questo tipo di regime e la classica combustione convenzionale diesel utilizzando una singola iniezione di carburante; successivamente si mostrerà come risponde il regime HCCI alle modifiche quali lo splittamento dell'iniezione singola in più iniezioni aventi caratteristiche differenti sia per il tempo di iniezione sia per la quantità di massa iniettata; il tutto verrà affrontato in questo Capitolo con una frazione nulla di EGR.

6.5.1 *Validazione*

In Figura 6.8 è mostrato il confronto tra i risultati numerici e quelli sperimentali sia per quanto riguarda la pressione media effettiva indicata (IMEP) sia il consumo specifico indicato di carburante (ISFC). E' evidente come i dati numerici siano ragionevolmente vicini ai valori sperimentali sia per la tempistica di iniezione che caratterizza i motori diesel convenzionali sia quelli che riguardano la combustione in regime HCCI, quindi per ogni regime di combustione.

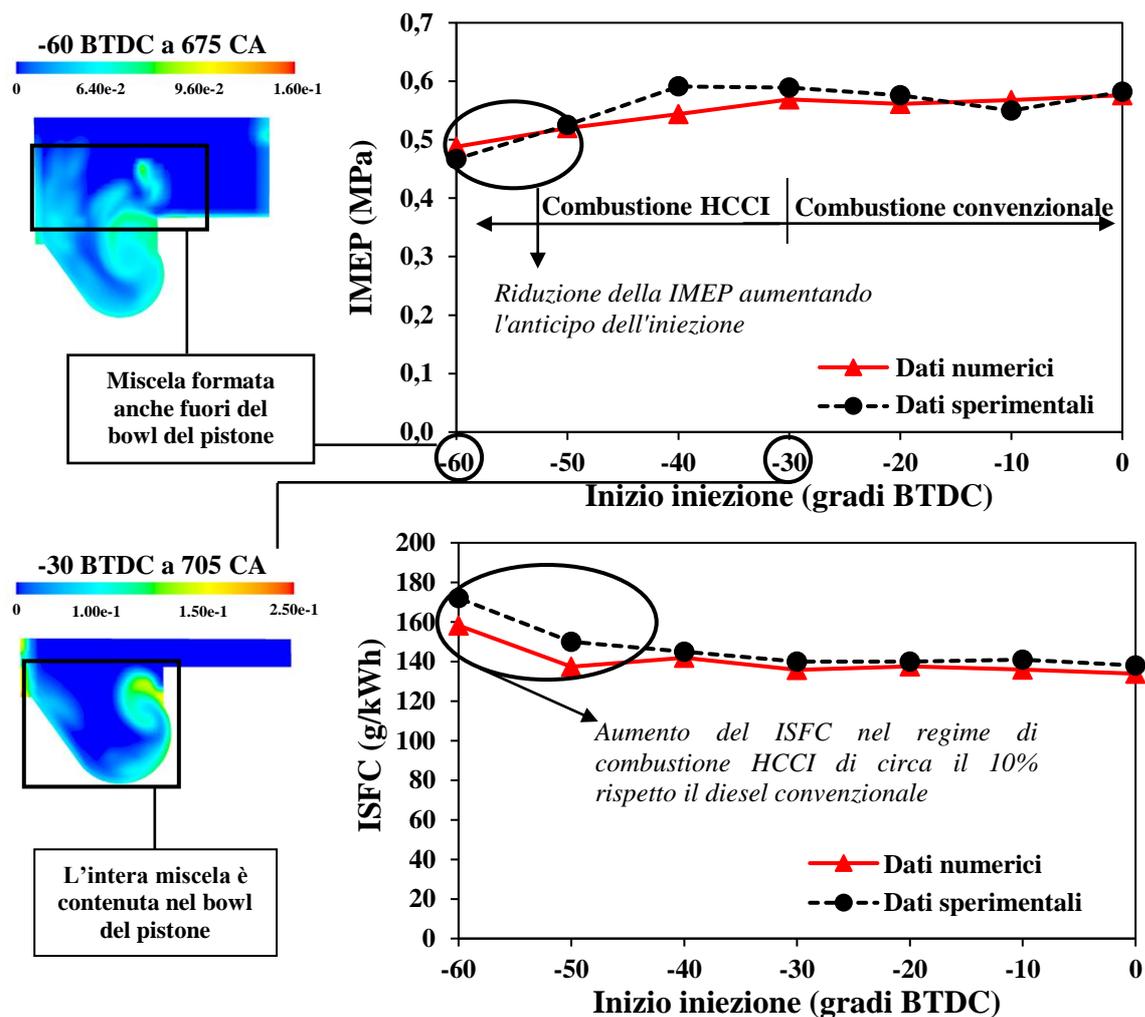


Figura 6.8 Effetto dell'injection timing su IMEP e ISFC per la singola iniezione: comparazione tra dati numerici e sperimentali [22].

La diminuzione della IMEP e quindi l'aumento del relativo ISFC per tempi di iniezione molto anticipati (50 e 60 deg BTDC) sono dovuti ad un abbassamento del rendimento di combustione. Infatti, in queste condizioni di funzionamento la formazione della miscela può parzialmente avvenire nella camera di combustione e non solo nel bowl del pistone, producendo una riduzione della pressione nel cilindro durante la corsa di espansione. Inoltre, introducendo il combustibile con molto anticipo durante la fase di compressione si va ad aumentare il lavoro di pompaggio; anche questo va ad inficiare sull'efficienza globale e quindi sul consumo specifico. In figura viene mostrato anche un confronto tra la mappa della frazione in massa di carburante 15 gradi dopo la fine dell'iniezione per i casi -30 e -60 deg BTDC proprio a dimostrazione di quanto appena detto: in quest'ultima strategia, nonostante lo stretto angolo tra gli spray

dell'iniettore, non vi è un perfetta corrispondenza tra il bowl e il moto del pistone, con conseguente fuoriuscita di parte del carburante dalla camera di combustione. Un'altra conseguenza è l'aumento delle concentrazioni di HC e CO allo scarico. La Figura 6.9 mostra la concentrazione di CO per le varie fasature dell'iniezione indagate: valori costanti fino a iniezioni prossime ai 40 deg BTDC, sono seguite da un aumento delle stesse quando si va ad iniettare a 50 e 60 deg BTDC.

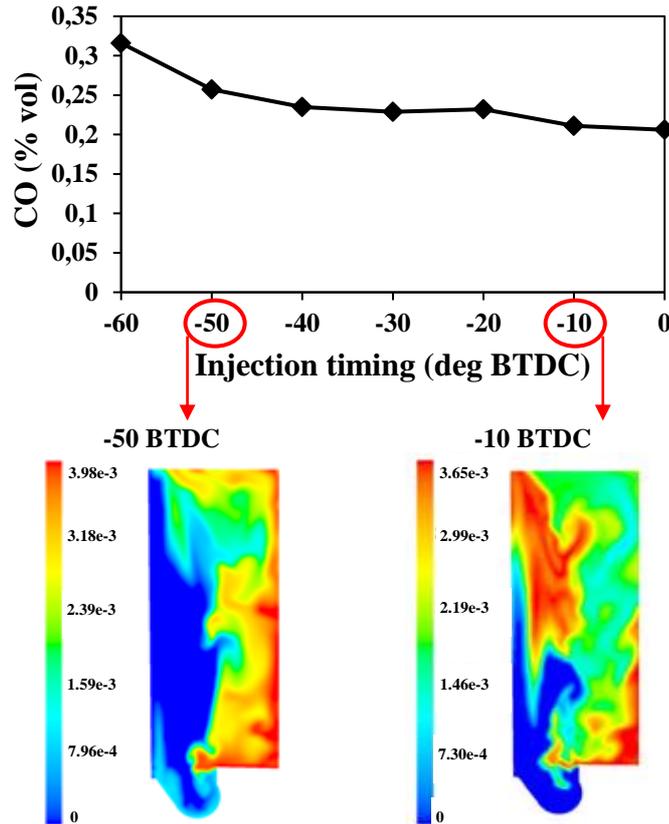


Figura 6.9 Effetto delle strategie di combustione sulla concentrazione finale di CO.

Per completare la validazione del modello numerico, in Figura 6.10 vengono mostrati i risultati relativi all'emissione degli NO_x ottenuti per via numerica e il loro confronto con i valori sperimentali. Si vede come il codice implementato sia in grado di catturare in maniera ottimale il tasso di formazione degli NO che ha una forte dipendenza dalla omogeneità della miscela. Inoltre, è possibile notare come il codice riesca a distinguere i vari regimi di combustione: la regione ad alta formazione di NO che caratterizza la convenzionale tempistica di iniezione dei diesel (10 e 20 deg BTDC), la regione caratterizzata dalla riduzione di NO relativa alle iniezioni anticipate (30, 40, 50 deg BTDC) e quelle ritardate (0 deg BTDC). Quando l'inizio dell'iniezione viene

anticipato oltre i -30 gradi prima del PMS, la concentrazione di NO allo scarico diviene inferiore ai 100 ppm e trascurabile per i casi di -50 e -60 gradi prima del punto morto superiore (circa 40 e 10 ppm rispettivamente).

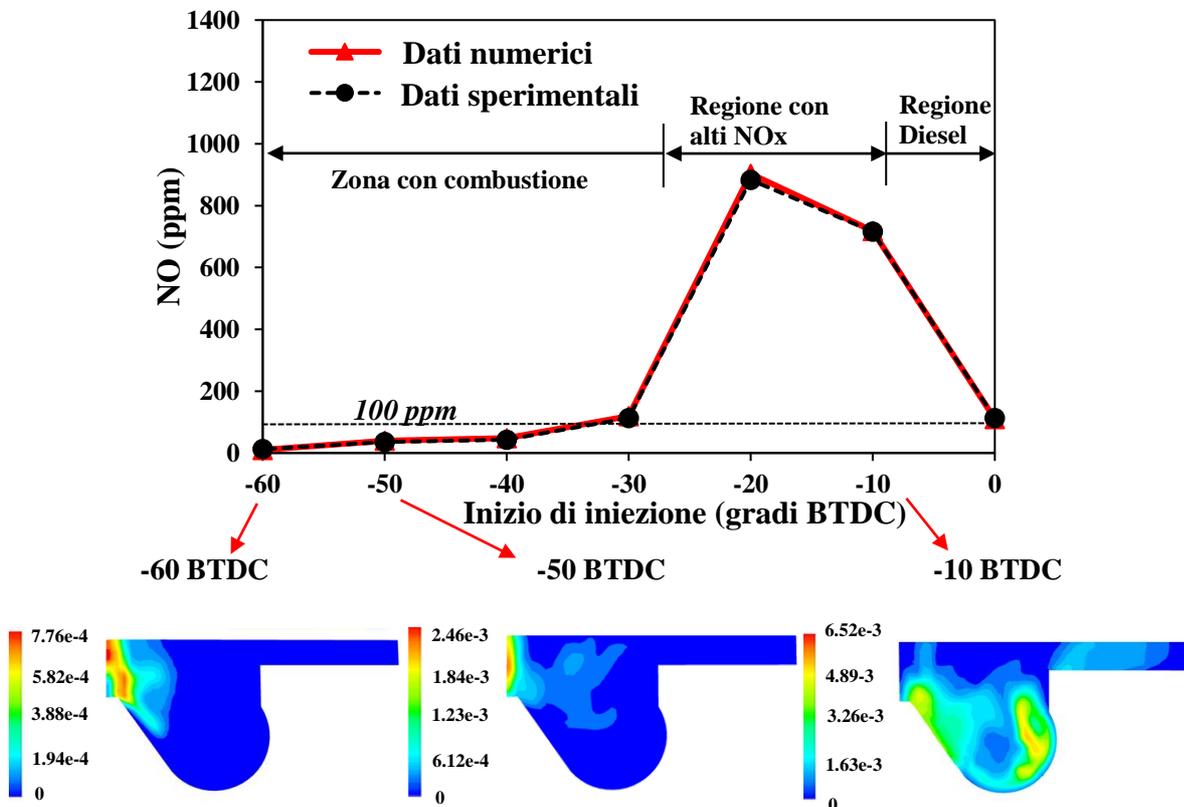


Figura 6.10 Effetto dell'anticipo dell'iniezione sulle emissioni di NO, con vista dell'interno del cilindro a 740 CA.

In Figura 6.11 è mostrata la diretta correlazione tra la concentrazione di NO e la temperatura nel cilindro. Nel grafico è visibile l'evoluzione temporale della temperatura e quello della frazione massica di NO, entrambe mediate per la massa interna alla camera di combustione. Si può vedere come sia impossibile basare queste analisi solo sulla temperatura mediata del gas, dato che le differenze di questa tra le varie strategie di iniezione sono piccole durante le loro evoluzioni temporali. Per questo è necessario che l'emissione di NO sia direttamente correlata alla distribuzione di temperatura all'interno del cilindro. È infatti evidente che nel caso di injection timing convenzionali la mappa di temperatura all'interno della camera è caratterizzata da estese regioni ad alta temperatura che portano ad alte concentrazioni finali di NO (Figura 6.10). D'altra parte, le strategie di combustione HCCI producono un campo di temperatura omogenea

dove la temperatura sale oltre 2000 K solo in alcune zone confinate, particolarmente per i casi di iniezione a -40 e -50 gradi prima del PMS.

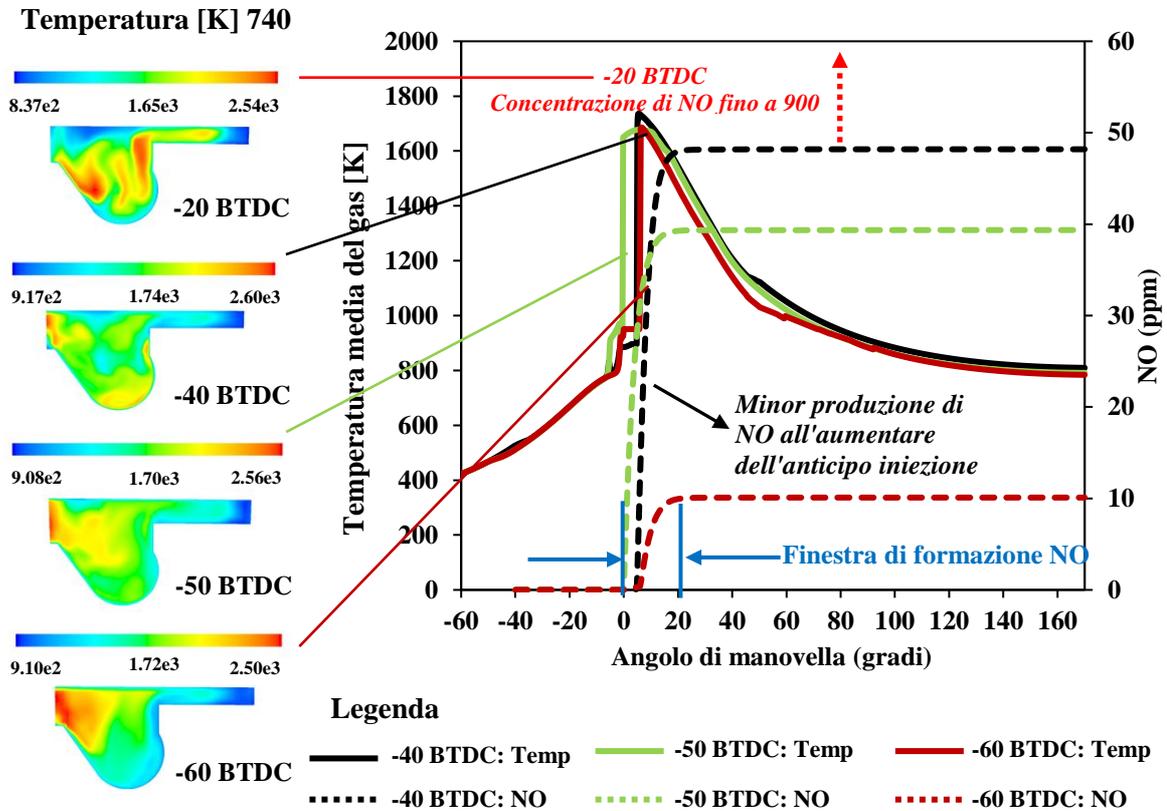


Figura 6.11 Correlazione tra la concentrazione di NO e la temperatura nel cilindro a 740 CA.

Per riassumere e confrontare in maniera più dettagliata i casi trattati, in Figura 6.12 sono mostrate alcune grandezze caratteristiche per la formazione degli NO al variare dell'anticipo dell'iniezione: rapporto di miscela, temperatura e frazione in massa di NO. È possibile vedere come con l'aumentare dell'anticipo dell'iniezione, la carica immessa si miscela maggiormente nel cilindro. Infatti, nel caso di diesel convenzionale con iniezione 10 gradi prima del PMS, il combustibile è quasi completamente confinato alla parete del bowl del pistone, mentre anticipando l'iniezione si vede che la massa di combustibile si va a miscelare con l'aria della camera. Ciò comporta che la frazione di miscela presente poco prima della combustione a 712 CA (8 gradi prima del PMS) sia maggiormente distribuita nel volume e abbia valori più bassi nel caso di iniezioni molto anticipate. A questo segue il fatto che la distribuzione di temperatura, durante la combustione sia uniforme nel volume e che soltanto in zone ristrette abbia valori superiori ai 2000 K. Questo va tutto a vantaggio delle basse emissioni dell'HCCI. È

visibile infatti in figura, che la zona in cui si sono formati gli NO_x per iniezione a -60 BTDC sia confinata e abbia valori massimi più bassi rispetto agli altri casi. La figura esprime il vero funzionamento dell'HCII, ovvero la formazione di una carica più omogenea possibile con piccole zone ad elevata temperatura e con conseguenti drastiche riduzioni di NO.

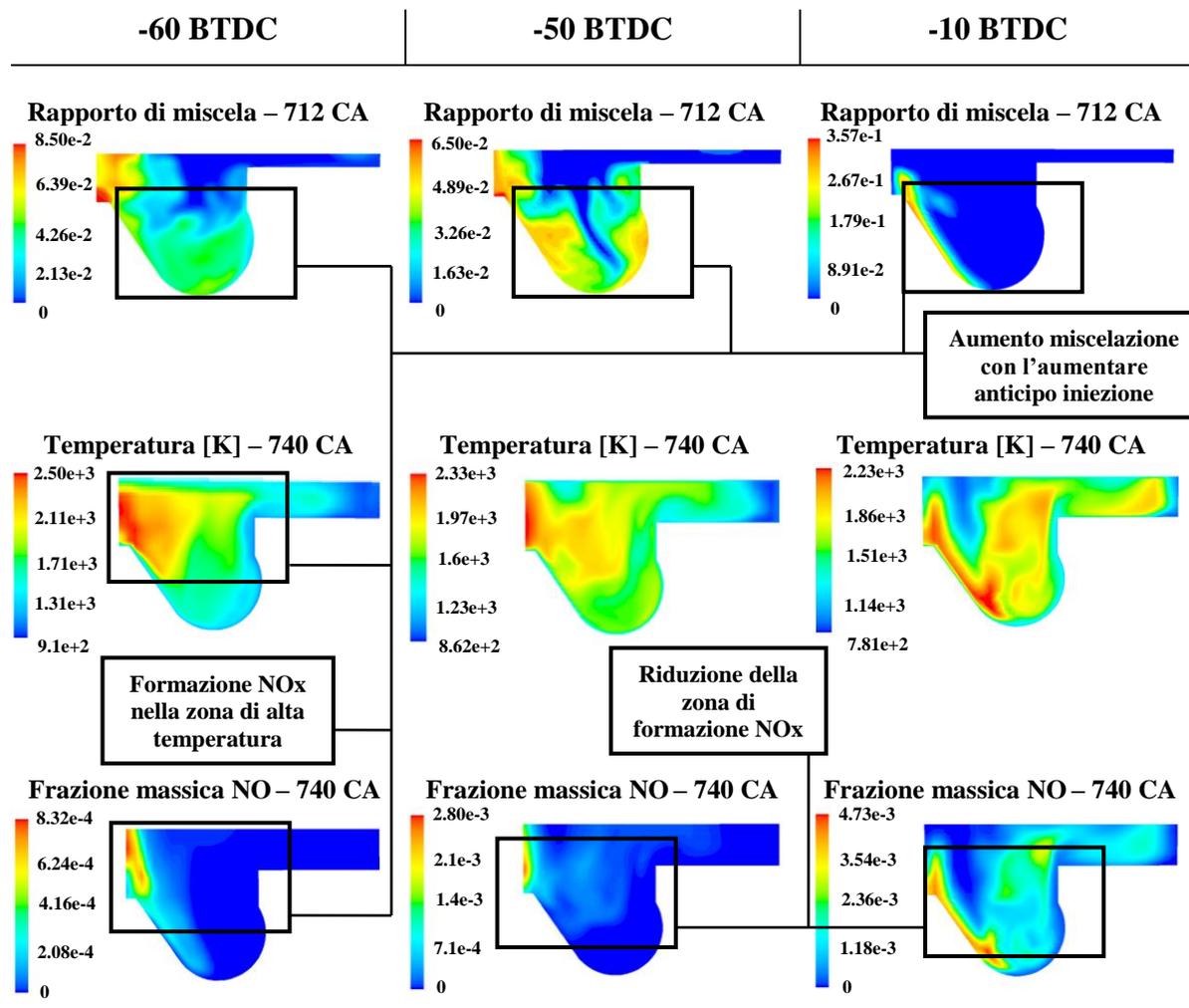


Figura 6.12 Mappe di rapporto di miscela, temperatura e frazione massica di NO al variare dell'anticipo iniezione.

In Figura 6.13 si può vedere più in dettaglio la miscelazione della carica per il caso di iniezione a -50 deg BTDC. A sinistra è mostrata la frazione in massa di combustibile all'interno del cilindro, nella seconda è mostrata invece la vorticità. Si può vedere come la carica si stia miscelando nel centro della bowl del pistone. È proprio grazie alla vorticità dovuta alla geometria della testa del pistone e ai moti dell'aria come

lo swirl che si aumenta la possibilità di miscelare il combustibile con l'aria e si ha una omogeneizzazione migliore.

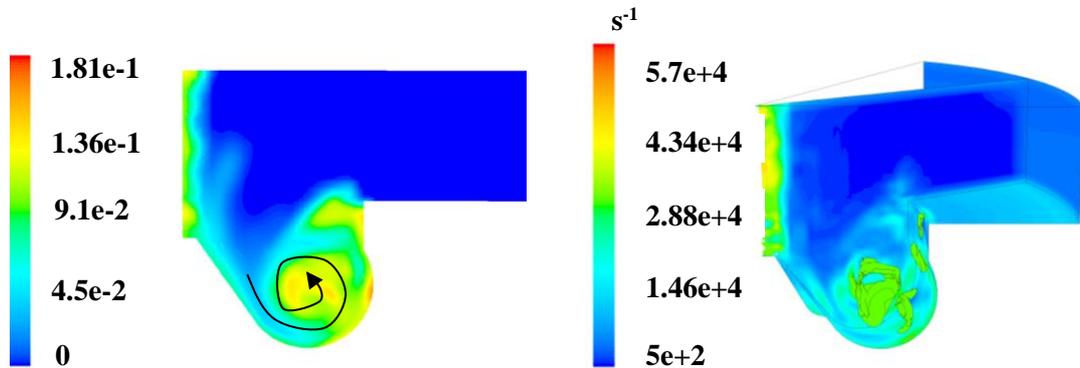


Figura 6.13 Mappa della frazione massica di combustibile sul piano mediano e mappa 3D della vorticità.

Per quanto riguarda le emissioni di particolato, avere una miscela omogenea con assenza di zone ad alta concentrazione di combustibile determina una riduzione sostanziale nella produzione di particolato. Nello studio è stato verificato che in ogni caso esaminato le condizioni termo-fluidodinamiche interne al cilindro portano ad un annullamento delle concentrazioni di soot. Questo è un risultato tipico per le strategie della combustione HCCI a causa di una drastica riduzione del tasso di *formazione* del particolato (Figura 6.14).

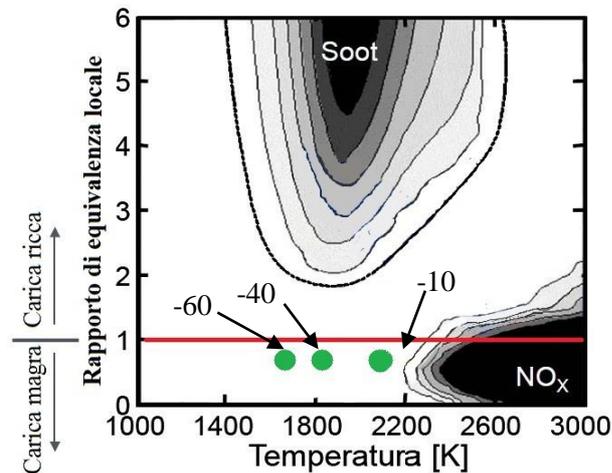


Figura 6.14 Punti operativi della combustione HCCI.

Nella Figura 6.15 sono poste in evidenza le differenze presenti nell'andamento del rilascio del calore tra i casi di combustione diesel convenzionale (iniezione a -10 deg BTDC) e combustione HCCI (iniezione 50 deg BTDC). Si può vedere come nell'innovativo regime di combustione il rilascio di calore sia caratterizzato dalla

presenza di due picchi: il primo, che è più lieve, è dovuto al numero di ottano del carburante a causa del fenomeno delle fiamme fredde, che in questo caso si sviluppano a una temperatura media di circa 800 K, il secondo invece è causato dalla combustione principale, che si innesca a una temperatura media compresa tra i 970 K e i 1050 K.

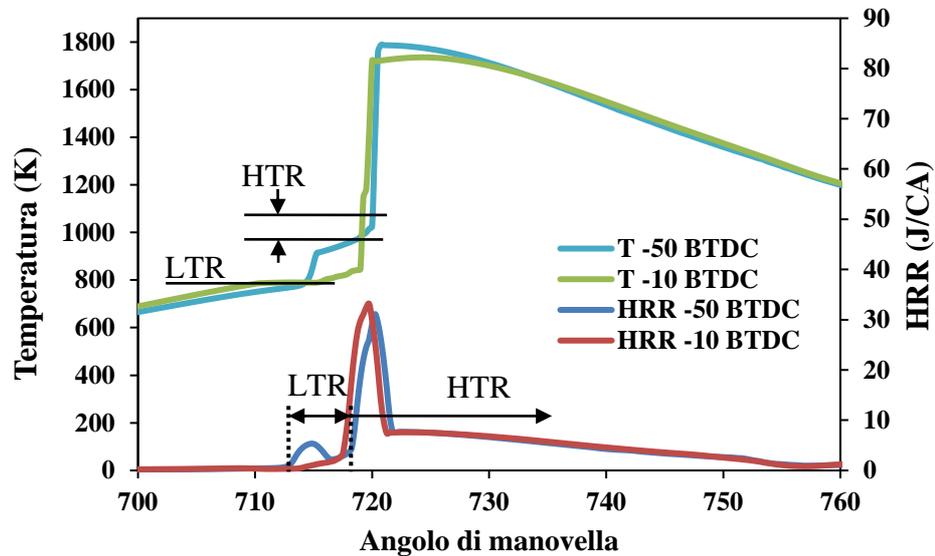


Figura 6.15 Confronto tra HRR e temperatura per i casi di iniezione a -50 e -10 deg BTDC.

In questo studio, la fase di innesco delle reazioni a bassa temperatura (*Low Temperature Reaction, LTR*) è stata definita come il momento in cui la curva dell'HRR sale oltre 1 J/CA. Anche tempi di accensione delle reazioni ad alta temperatura (*High Temperature Reaction, HTR*) sono definiti come il momento in cui l'HTR sale oltre 1 J/CA. Se LTR e HTR sono vicini nel tempo e le velocità di rilascio di calore di queste due fasi sono sovrapposte parzialmente, il momento di accensione è stato definito come l'istante in cui l'Heat Release Rate aumenta subito dopo la diminuzione della LTR. Tali definizioni sono fondamentali per la stima del ritardo all'accensione, differenza tra l'istante di ignizione della carica e quello di iniezione del combustibile nel cilindro.

In Figura 6.16 è mostrata proprio la correlazione tra l'ignition delay e la frazione della miscela nel cilindro (che è una misura della omogeneità di carica) appena prima l'accensione. È evidente che, anticipando l'inizio dell'iniezione, il carburante ha un tempo più lungo per formare una carica omogenea che quindi può essere distribuita uniformemente all'interno del cilindro. Al contrario, la combustione diffusiva diviene il meccanismo principale di ossidazione introducendo il carburante vicino al punto morto superiore: in figura, per il tempo di iniezione pari a 10 deg BTDC, si evidenzia una

distribuzione di carburante concentrata sopra la tazza del pistone prima che la combustione si avvii.

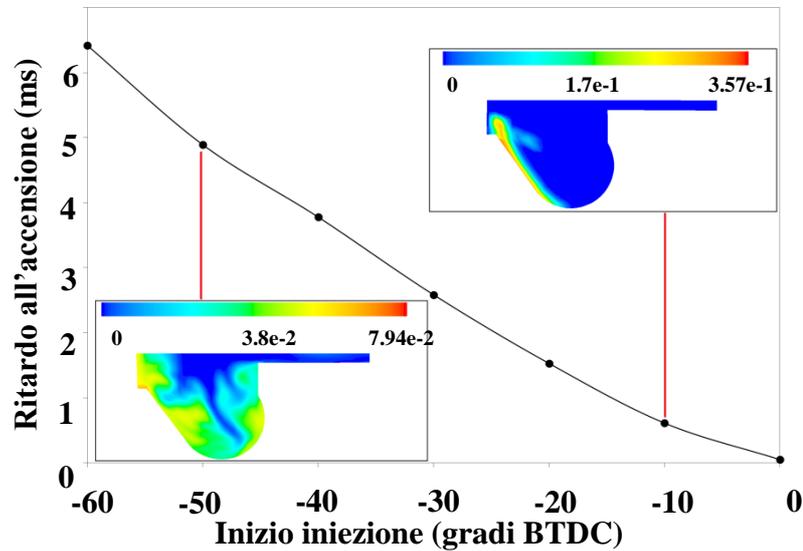


Figura 6.16 Ritardo all'accensione all'aumentare dell'anticipo iniezione e mappa della frazione di miscela a 712 CA

6.5.2 Iniezioni multiple

Tra le varie strategie utilizzate nei recenti motori diesel, una delle più avanzate ed utili a ridurre contemporaneamente gli NO_x e le emissioni di fuliggine, pur mantenendo bassi i consumi di carburante e alte le prestazioni del motore, è quella dell'iniezione multipla. I vantaggi della iniezione multipla sono stati dimostrati da diversi studi e applicazioni, e oggi sono una delle principali tecnologie in grado di garantire i risultati appena richiamati. Per mezzo di queste, la quantità totale di carburante da iniettare è divisa in più iniezioni. A differenza delle ultime tecnologie di iniezione multipla dei motori diesel, in cui sono presenti due o più iniezioni pilota che forniscono circa il 10% della massa totale, una iniezione principale e una post iniezione, nel presente studio si dividerà la quantità immessa nel volume in due parti. Infatti, in ottica HCCI, si eseguono solamente due iniezioni perché si deve cercare di iniettare la maggior parte del combustibile con maggior anticipo così da riuscire a formare la carica omogenea.

In questo studio, per avere la possibilità di fare un confronto con i dati della validazione, la quantità di combustibile totale iniettata è stata lasciata invariata, ed è stata divisa in due iniezioni con differenti configurazioni. E' stato studiato l'effetto della

variazione dell'istante della prima iniezione (casi -50 e -60 deg BTDC) dato che sono quelli caratteristici della combustione HCCI e hanno dato i migliori risultati dal punto di vista di emissioni; è stato variato l'angolo di inizio della seconda iniezione per i valori di 5, 10, 15, 20 gradi dopo il punto morto superiore; infine è stata variata la percentuale di massa iniettata nei due impulsi, con valori ripartiti come 80-20 %, 70-30% e 60-40%, dove il primo valore percentuale si riferisce alla percentuale di massa totale immessa con la prima iniezione e il secondo valore è relativo alla massa della seconda iniezione. Sono state fatte tutte le possibili combinazioni di queste variazioni e si è quindi arrivati a un numero di casi totale pari a 24 (Figura 6.17).

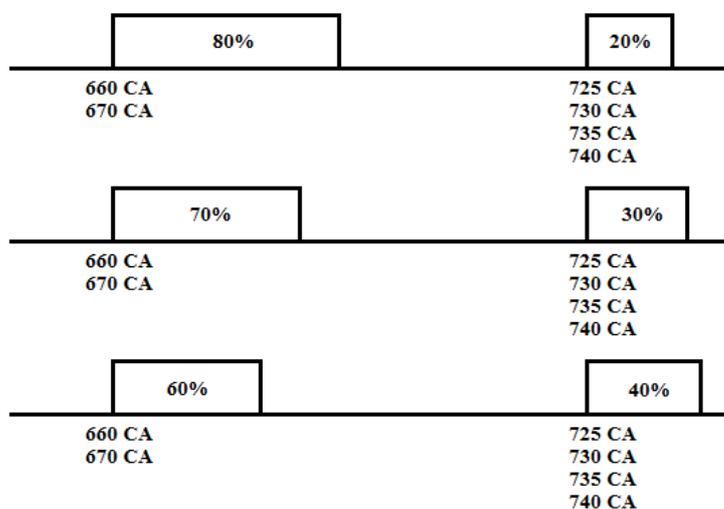


Figura 6.17 Quadro generale delle differenti strategie di iniezione multipla investigate.

Il cambiamento sia del tempo di iniezione sia della frazione di combustibile immessa permette di determinare la strategia ottimale di combustione dal punto di vista della riduzione delle emissioni inquinanti.

6.5.2.1 *Analisi dell'effetto delle iniezioni multiple*

La Figura 6.18 mostra il confronto tra tre diverse strategie di combustione tramite l'andamento dell'HRR. Il primo è il diesel convenzionale (qui rappresentato dall'iniezione 20 gradi prima del punto morto superiore), il secondo è il regime HCCI iniezione singola (caso con iniezione 50 deg BTDC) e l'ultimo è la doppia iniezione HCCI (50 deg BTDC / 10 deg ATDC) con le tre differenti ripartizioni di massa di combustibile iniettato prima e dopo.

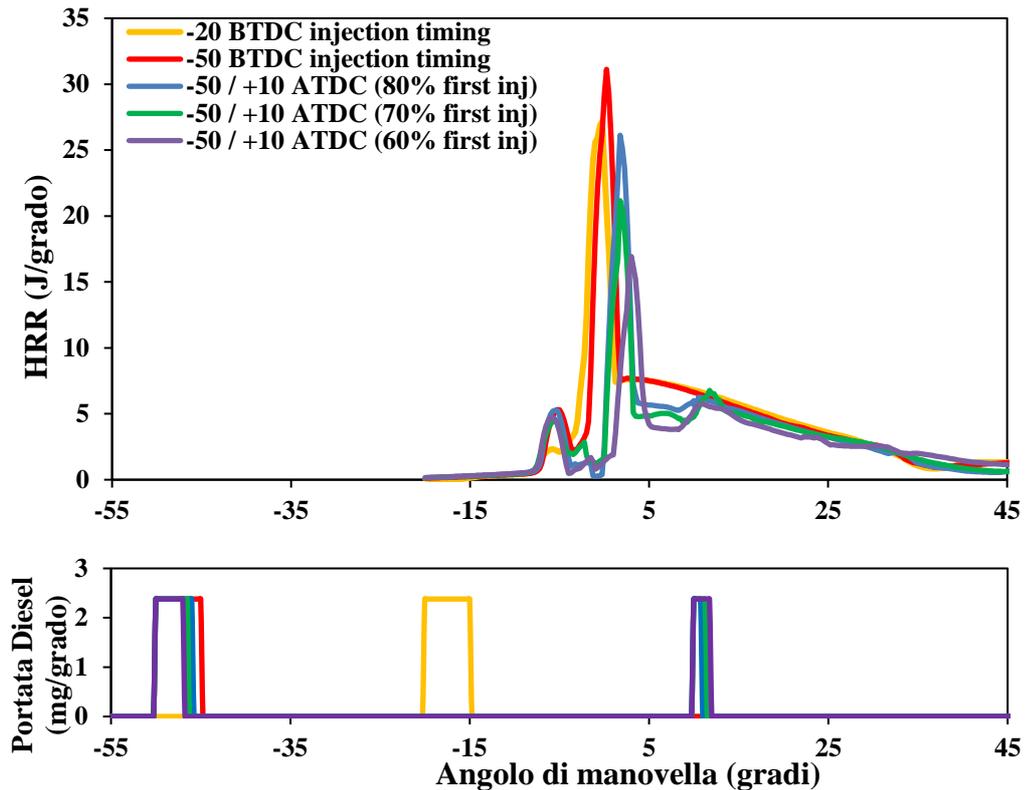


Figura 6.18 Diagramma HRR: confronto tra diverse strategie di iniezione: convenzionale, HCCI con singola iniezione e HCCI con doppia iniezione.

Mentre la combustione diesel convenzionale è più simile al tipo diffusivo poiché il combustibile è concentrato in una piccola zona del cilindro nel momento in cui si verifica l'accensione, si può notare che qualsiasi strategia HCCI è caratterizzata dalla presenza del rilascio di calore LTR e HTR. Allo stesso tempo, la combustione del combustibile iniettato nella post, è propriamente diffusiva. Infatti, come mostrato in Figura 6.18, confrontando la fasatura della seconda iniezione con il rilascio di calore dovuto alla sua combustione, si nota che non vi è praticamente alcun ritardo di accensione in questi casi.

Focalizzando l'attenzione su casi con iniezione multipla, è chiaro che il valore massimo della HRR diminuisce con la percentuale di carburante introdotta con il primo impulso: ciò è dovuto alla minore influenza della combustione omogenea premiscelata. La conseguenza di ciò è la riduzione dei picchi di temperatura all'interno del cilindro che porta quindi alla diminuzione della concentrazione di NO. La Figura 6.19 mostra l'iso-temperatura a 1700 K colorata in base alla frazione molare degli NO a 740 CA (quindi alcuni gradi dopo la fine della combustione della seconda iniezione) per i casi sopra discussi. Nelle seguenti considerazioni questa superficie sarà presa come

rappresentativa del fronte di fiamma. Guardando la figura si evince che la sua estensione è progressivamente ridotta dal caso di diesel convenzionale a quello con doppia iniezione HCCI, come conseguenza del tasso di rilascio di calore più graduale. Inoltre, si vede che il valore massimo di concentrazione degli NO sul fronte di fiamma si abbassa al diminuire della quantità di carburante associato alla prima iniezione, visto che è ridotta la fase di combustione che si verifica in prossimità del PMS dove la temperatura è massima e il tempo di permanenza dei gas all'interno della camera di combustione è elevato a causa della bassa velocità del pistone. Inoltre, l'effetto della seconda iniezione sulla temperatura è limitato dato che si verifica durante la corsa di espansione, quindi quando la temperatura è in rapida diminuzione. Questo è un meccanismo che è stato osservato in qualsiasi strategia HCCI con iniezione multipla. La Figura 6.20 estende questa analisi prendendo in considerazione i parametri più importanti, ovvero il timing delle due iniezioni e la quantità di carburante iniettata in ciascuna di esse.

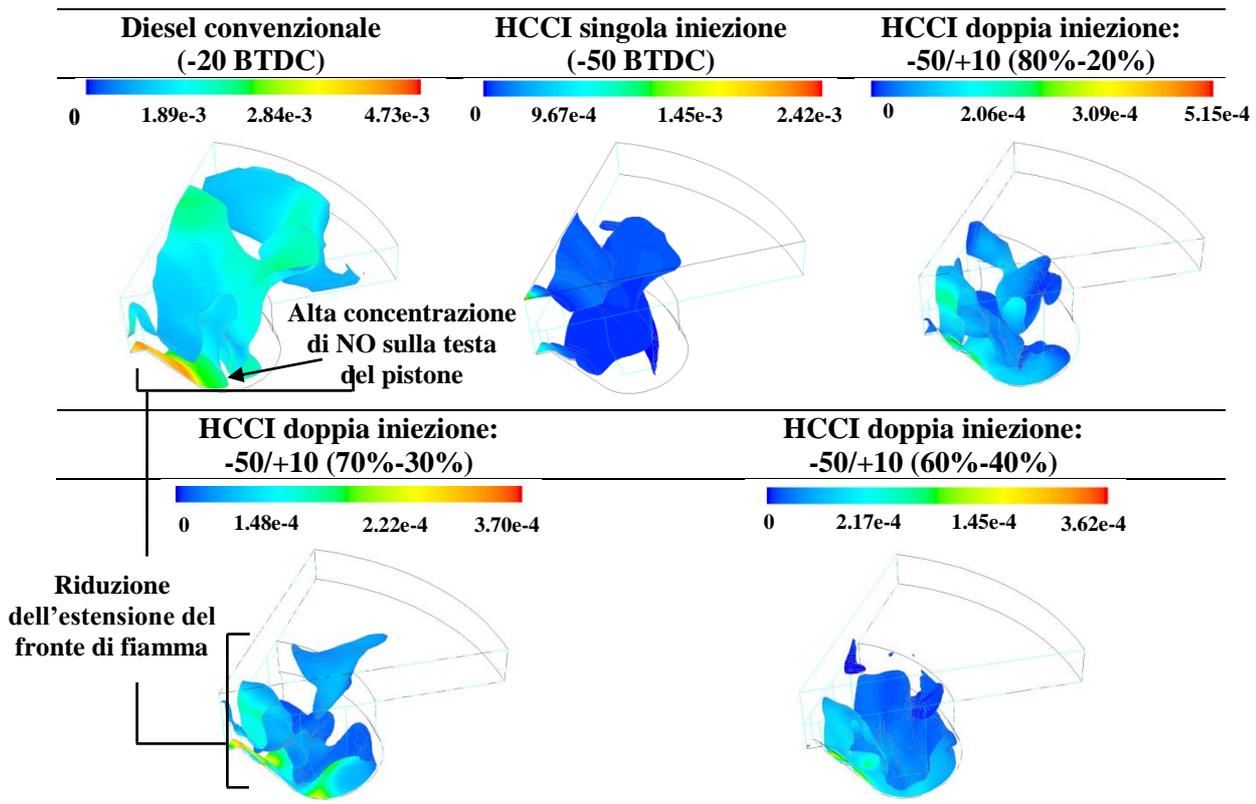


Figura 6.19 Iso temperatura a 1700 K colorata in base alla mole fraction di NO: confronto tra i tre regimi di combustione.

Quanto detto è evidente soprattutto per i casi aventi prima iniezione 50 deg BTDC che presentano una diminuzione di NO quando la quantità di carburante del primo impulso viene ridotta, per tutte le seconde temporizzazioni delle iniezioni indagate. Invece, non sembra avere un grande effetto sui casi con prima iniezione a 60 gradi prima del PMS. Inoltre, la Figura 6.20 mostra la tendenza, per entrambi i valori di fasatura della prima iniezione (50 e 60 deg BTDC), della riduzione delle emissioni inquinanti NO con l'aumentare del ritardo del secondo impulso, anche se questo effetto è sempre meno evidente: per 20 ATDC per la seconda temporizzazione dell'iniezione, le emissioni di NO sono quasi trascurabili nella maggior parte dei casi esaminati ed inferiori al caso -60 BTDC singola iniezione (Figura 6.10). Allo stesso tempo, anche per le strategie con doppia iniezione, anticipare la prima iniezione porta alla riduzione della concentrazione di NO. Infatti, per la stessa seconda temporizzazione di iniezione, la produzione di NO è sempre inferiore per il primo impulso impostato a -60 gradi prima del punto morto superiore. Di tutte le strategie con prima iniezione a 50 deg BTDC, soltanto in una simulazione (-50 BTDC / +5 ATDC e ripartizione in massa 80-20%) l'emissione di NO è maggiore rispetto al caso di iniezione unica; negli altri casi l'emissione di NO è stata drasticamente ridotta.

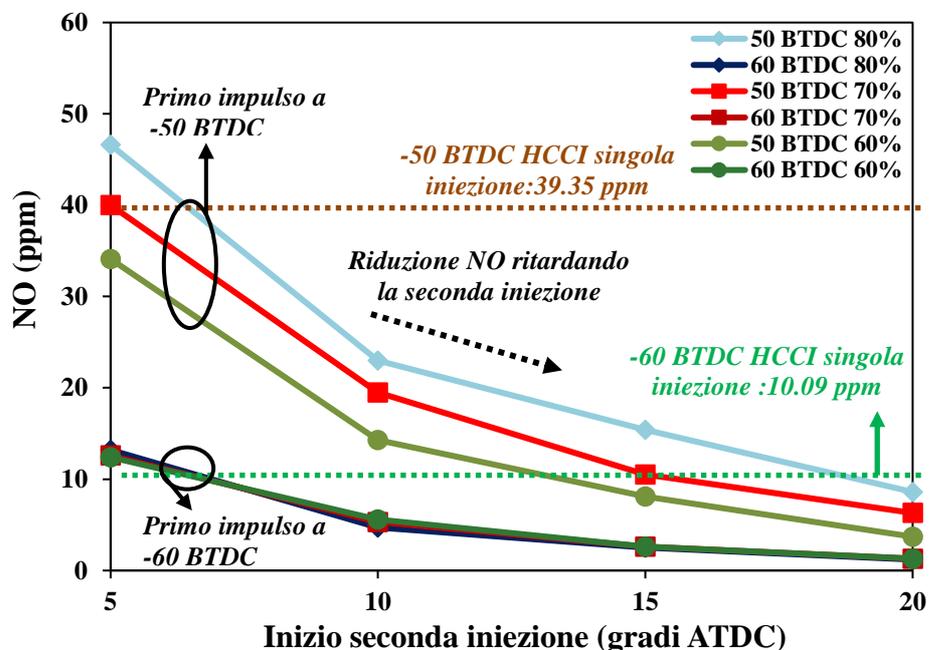


Figura 6.20 Influenza della fasatura della seconda iniezione e della differente quantità di massa iniettata sulle emissioni di NO.

In Figura 6.21 sono mostrate le temperature e le frazioni in massa di NO prodotte per 3 diverse strategie di doppia iniezione con prima iniezione a 50 deg BTDC: la prima è caratterizzata dal 60% di massa iniettata durante la prima iniezione e dalla fasatura della seconda iniezione a 10 deg ATDC; la seconda caratterizzata dalla stessa fasatura della prima, ma con massa dell'80% del totale immessa nella prima iniezione; e la terza strategia avente l'injection timing della seconda iniezione molto ritardata a 20 gradi dopo il punto morto superiore. Si vede subito come il campo di temperatura sia contraddistinto in tutti i casi da regioni in cui il relativo valore è compreso tra i 1500 e i 1600 K. Si può notare inoltre, come, all'aumentare della massa iniettata nel primo impulso e a parità di fasatura di iniezione, aumentano gli NO prodotti. Questo è direttamente connesso all'aumento del calore rilasciato e all'incremento di temperatura che vi è aumentando la massa immessa nella fase con combustione premiscelata. È inoltre visibile ciò che si diceva in precedenza riguardo la post iniezione: la frazione in massa degli NO va diminuendo all'aumentare del ritardo della seconda iniezione, questo perché la combustione sta avvenendo durante la fase di espansione, durante la quale vi è un abbassamento di temperatura. Tra i tre casi sotto raffigurati si vede che il terzo corrisponde alla emissione più bassa di NO tra tutte le strategie con prima iniezione a 50 gradi prima del PMS, così come era rappresentato anche in Figura 6.20.

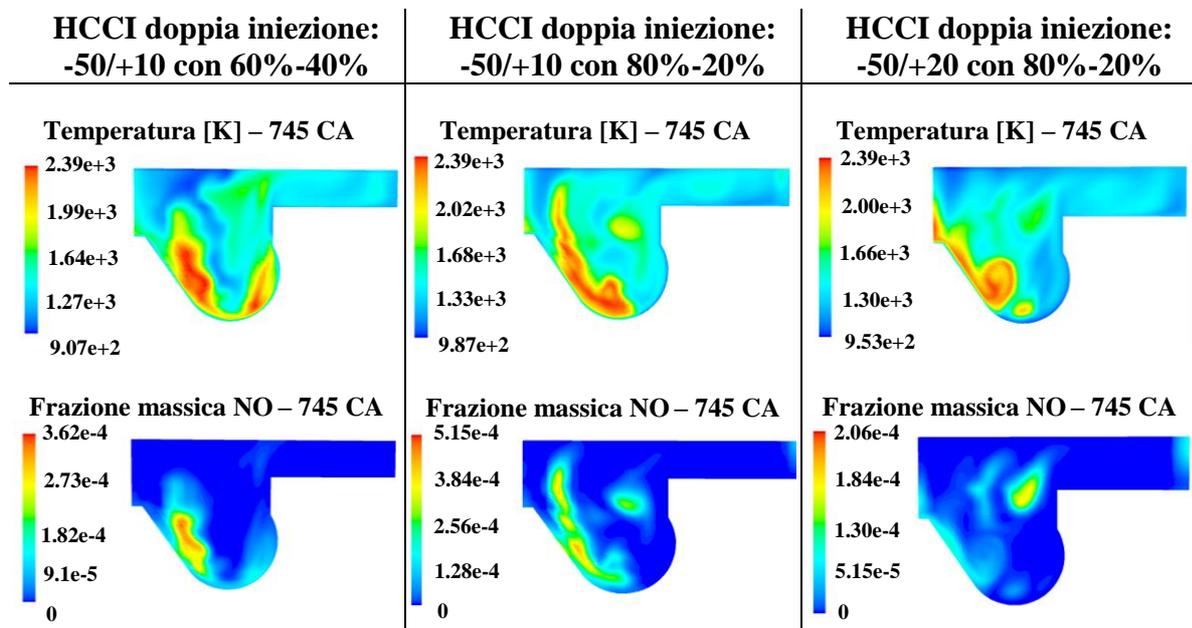


Figura 6.21 Mappe di temperatura e frazione di NO per tre strategie diverse di iniezione multipla.

Un altro vantaggio dell'utilizzo della strategia con la doppia iniezione per un motore HCCI è la riduzione degli HC parzialmente combusti. Come detto prima, tali emissioni possono essere correlate direttamente con la produzione di CO e in Figura 6.22 vengono confrontate le mappe interne al cilindro della concentrazione di CO alla apertura dello scarico (Exhaust Valve Open EVO) per alcuni dei casi presi a riferimento. Anche se il valore massimo di CO nella scala è maggiore per casi doppia iniezione, il valore mediato nel volume invece diminuisce in qualsiasi strategia di multi-iniezione poiché queste zone sono localizzate solo vicino all'asse del cilindro.

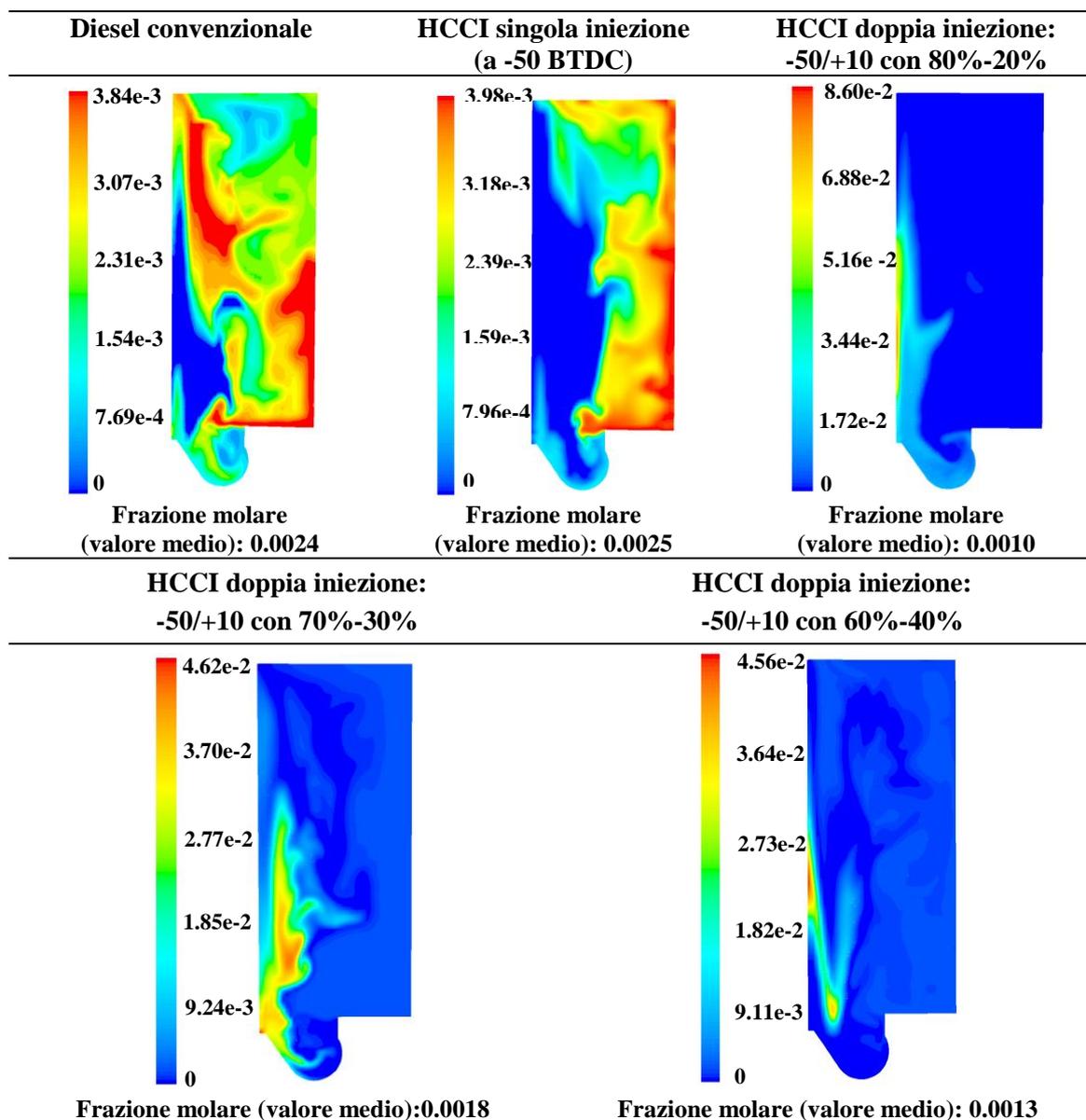


Figura 6.22 Concentrazione di CO allo scarico: effetto delle iniezioni multiple in confronto con diesel convenzionale e HCCI singola iniezione a -50 BTDC.

La concentrazione inferiore di CO è dovuta alla riduzione della carica che si è andata a formare al di fuori della camera di combustione per la fasatura di iniezione molto anticipata. I casi con 80-20% e 60-40% hanno delle emissioni di CO pari a circa la metà delle emissioni finali di monossido di carbonio delle prime due strategie presentate.

Un secondo effetto di questa ottimizzazione può essere visto per quanto riguarda la pressione media indicata e il consumo specifico di combustibile: escludendo la quasi totalità delle simulazioni aventi il 60% del combustibile iniettato durante la prima fase, negli altri casi con prima iniezione a -60 deg BTDC, la pressione indicata ha un valore superiore rispetto la configurazione con la singola iniezione, permettendo quindi la riduzione del consumo specifico di carburante.

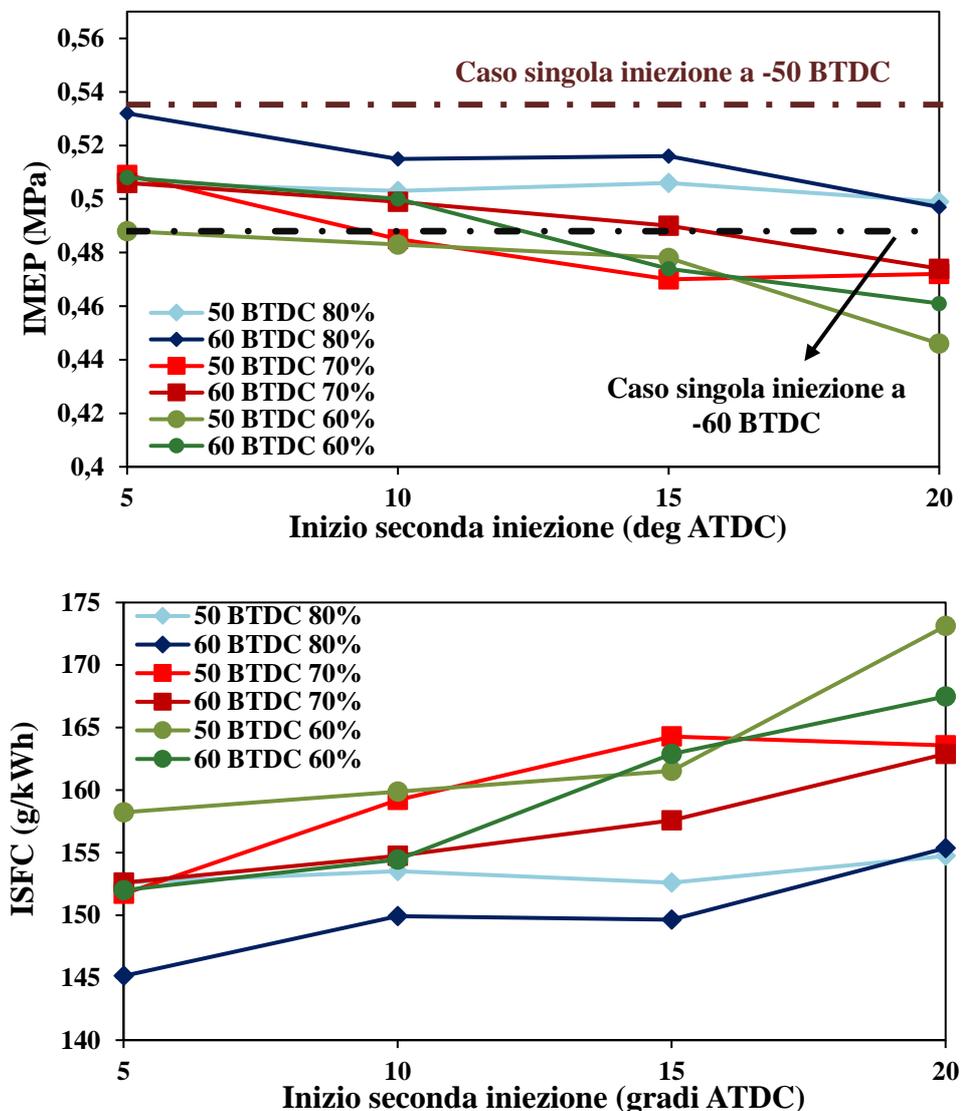


Figura 6.23 Effetto delle strategie con iniezione multipla sulla IMEP e ISFC.

Al contrario, per i casi aventi la prima iniezione a -50 gradi prima del punto morto superiore, può essere notata una riduzione dell'IMEP. Questo è ciò che avviene di solito tramite le iniezioni multiple: la divisione della massa di carburante in diversi impulsi comporta la riduzione dei picchi del calore rilasciato, e quindi anche della temperatura e della pressione, producendo così un aumento del consumo specifico di carburante.

Bibliografia

- [1] Dohle U., Kampmann S., Hammer J., Wintrich T., Hinrichsen C., “Advanced Diesel Common Rail Systems for Future Emission Legislation”, Robert Bosch GmbH, Stuttgart, Germany.
- [2] Gray A. W., Ryan T. W., “Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) of Diesel fuel”, Southwest Research Institute, SAE Paper 971676, 1997.
- [3] Nakagome K., Shimazaki N., Niimura K., Kobayashi S., “Combustion and Emission Characteristic of Premixed Lean Diesel Combustion Engine”, SAE Paper 970898, 1997.
- [4] Hasegawa R., Yanagihara H., “HCCI Combustion in DI Diesel Engine”, SAE Paper 2003-01-0745, 2003.
- [5] Kimura S., Aoki O., Kitahara Y., Aiyoshizawa E., “Ultra-clean combustion technology combining a low-temperature and premixed combustion concept for meeting future emission standards”, SAE Paper no. 2001-01-0200, 2001.
- [6] Iwabuchi Y., Kawai K., Shoji T., Kaleda Y., “Trial of new concept diesel combustion system – premixed compression- ignited combustion”, SAE Paper no. 1999-01-0185, 1999.
- [7] Yanagihara H., “Ignition timing control at Toyota “Unibus” combustion system”, Proceedings of IFP International Congress on a New Generation of Engine Combustion Processes for the Future?, pp. 34-42, 2001.
- [8] Bertoli C., Migliaccio M., “Il motore diesel per la trazione stradale”, Rocco Curto Editore, 1989.
- [9] Heywood J.B., “Internal Combustion Engine Fundamentals”, McGraw-Hill, 2000.
- [10] Ricco M., Stumpp G., “Common Rail – An Attractive Fuel Injection System for Passenger Car DI Diesel Engines”, SAE Paper no. 960870, 1996.
- [11] Dec J., “A Conceptual Model of DI Diesel Combustion Based on Laser-Sheet Imaging”, SAE Paper 970873, 1997.
- [12] Zhao F., Asmus T. W., Assanis D. N., Dec J. E., Eng J. A., Najt P. M., “Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines, Key Research and Development Issues”, SAE International, 2003.

- [13] Gray A. W., Ryan III T. W., “Homogeneous charge compression ignition (HCCI) of diesel fuel”, SAE Technical Paper No. 971676, 1997
- [14] Kaneko N., Ando H., Ogawa H., Miyamoto N., “Expansion of the operating range with in-cylinder water injection in a premixed charge compression ignition engine”, SAE Technical Paper No. 2002-01-1743, 2002
- [15] Agakawa H., Miyamoto T., Harada A., Sasaki S., Shimazaki N., Hashizume T., Tsujimura K., “Approaches to solve problems of the premixed lean diesel combustion”, SAE Technical Paper No. 1999-01-0183, 1999
- [16] Takeda Y., Nakagome K., Niimura K., “Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion with Extremely Early Staged Fuel Injection”, SAE Technical Paper No. 961163, 1996
- [17] Hashizume T., Miyamoto T., Agakawa H., Tsujimura K., “Combustion and emissions characteristics of multiple stage diesel combustion”, SAE Technical Paper No. 980505, 1998
- [18] Yanagihara H., “Ignition timing control at Toyota “UNIBUS” combustion system”, Proceedings of the IFP International Congress on a New Generation of Engine Combustion Processes for the Future?, pp. 34-42, 2001.
- [19] Patel, A; Kong, S; and Reitz, R. Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations. SAE Technical Paper 2004-01-0558; 2004.
- [20] Pucher GR, Gardiner DP, Bardon MF, Battista V. Alternative combustion systems for piston engines involving homogeneous charge compression ignition concepts – a review of studies using methanol, gasoline and diesel fuel. SAE paper 962063; 1996.
- [21] FLUENT v14.0 documentation.
- [22] Kim MY, Lee CS. Effect of a narrow fuel spray angle and a dual injection configuration on the improvement of exhaust emissions in a HCCI diesel engine. Fuel 2007; 86: 2871-2880.

7 Sfruttamento dell'EGR

L'obiettivo principale del presente Capitolo, è l'indagine degli effetti dell'EGR sulle prestazioni del motore e sulle emissioni inquinanti. È ben noto che il ricircolo dei gas di scarico all'interno della camera di combustione diminuisce le emissioni di NO_x limitando i picchi di temperatura dato il crescente calore specifico della miscela e la riduzione della concentrazione di ossigeno disponibile per la combustione [1-5]. Tuttavia, in configurazione HCCI, l'EGR viene principalmente utilizzato per prolungare ulteriormente il ritardo all'accensione e controllare la velocità di combustione, migliorando la miscelazione tra i reagenti [6-7]. Un'altra conseguenza dell'uso dell'EGR è la possibilità di aumentare il carico del motore: aumentando la frazione di EGR, i picchi di rilascio di calore e di pressione possono essere ridotti estendendo il campo di funzionamento del motore [8-9]. Al contrario, l'aumento della percentuale di EGR potrebbe comportare problemi durante le fasi transitorie per la stabilità della combustione [10].

7.1 *Calcolo della composizione di ossidante aspirato*

Per poter abbattere ulteriormente le emissioni di NO_x , si sfrutta il ricircolo dei gas combusti. Tale tecnica, infatti, riduce la temperatura adiabatica di fiamma, l'eccesso di ossigeno presente e permette quindi di limitare i picchi di temperatura. Inoltre, per via del maggiore calore specifico del comburente si riesce anche ad aumentare la pressione media effettiva. Come già specificato nei primi capitoli, per operare il ricircolo si prevede che parte dei gas combusti alla fine di un ciclo ritorni all'interno del cilindro e si opererà quindi la tecnica della riaspirazione.

Nelle simulazioni effettuate si sono studiati gli effetti di tre livelli di EGR (0%, 10% e 20%) sulle emissioni prodotte, in modo da poter valutare quale fosse la condizione operativa ottimale anche in considerazione delle prestazioni offerte dal motore. Sono stati simulati dei valori di EGR utilizzati negli attuali motori a combustione interna e non si è aumentata troppo tale percentuale dato che è stato dimostrato che aumentandola si promuove la formazione del particolato [11]. Per far ciò si è resa necessaria la valutazione della composizione del comburente proprio al variare della percentuale di EGR. La procedura adottata è stata quella di valutare innanzitutto la

composizione dei gas esausti allo scarico dei casi con EGR nullo e da tale composizione ricavare poi quella con cui inizializzare le simulazioni per EGR 10% e 20%.

Per quanto riguarda la composizione dei gas inizialmente contenuti nel cilindro nel caso di EGR fissato a 0% si è ovviamente potuta adottare quella che è la composizione dell'aria, considerandola costituita solamente da N₂ e O₂ con frazioni in massa rispettivamente di 0,767 e 0,233. Allo scarico dei casi simulati aventi EGR 0% si ha una composizione media riassunta nella seguente Tabella 7.1.

Specie chimica	Frazione in massa
N ₂	0,7523
O ₂	0,1513
CO ₂	0,064
H ₂ O	0,031
CO	0,0013
H ₂	0,0001

Tabella 7.11 Composizione dei gas di scarico con EGR 0%.

È stato omesso il contenuto di combustibile allo scarico, così come degli altri incombusti, in quanto la frazione in massa è inferiore a 0,00001, ovvero in percentuale vi è un contenuto di combustibile che è inferiore allo 0,001%.

Note le composizioni chimiche dell'aria e dei gas di scarico, è possibile valutare la composizione del comburente entrante nei casi di EGR non nulli, utilizzando la seguente formula:

$$\left(m_{f_j}\right)_{oxid\ EGR\%} = \left(m_{f_j}\right)_{gas} * EGR\% + \left(m_{f_j}\right)_{air} * (1 - EGR\%) \quad (1)$$

in cui m_{f_j} sta per la frazione in massa della specie j-esima e $EGR\%$ è il valore percentuale della frazione di EGR che si vuole considerare. Il primo termine quindi rappresenta la frazione in massa della j-esima specie che si avrà nell'aria aspirata nel caso della specifica percentuale di EGR. Questa è calcolata con la regola delle miscele, infatti il secondo e il terzo termine sono dati dal prodotto della frazione in massa della j-esima specie presente nei gas a fine ciclo e nell'aria, moltiplicati rispettivamente per la frazione con cui il gas ricircolato e l'aria fresca vengono a mescolarsi. Tale relazione ha permesso di ricavare le composizioni riportate nella tabella di seguito.

Specie chimica	EGR 0%	EGR 10%	EGR 20%
N ₂	0.767	0,76553	0,76408
O ₂	0.233	0,22483	0,21666
CO ₂	0	0,0064	0,0128
H ₂ O	0	0,0031	0,0062
CO	0	0,00013	0,00026
H ₂	0	0,00001	0,00002

Tabella 7.12 Composizione ossidante in ingresso al variare dell'EGR.

Bisogna specificare che il calcolo utilizzato è esaustivo a livello di precisione, anche se in parte semplificativo. Infatti, la procedura dovrebbe innanzitutto essere iterativa, e inoltre utilizzando questa formulazione si presuppone che le componenti chimiche dello scarico siano perfettamente distribuite nei gas stessi, senza avere delle densità maggiori o minori in alcune parti del volume.

7.2 Effetto dell'EGR sul ritardo all'accensione

Ciò che è stato premesso riguardo l'effetto dell'EGR e il suo uso nei motori a combustione HCCI, è ribadito anche in Figura 7.1, che mostra le curve HRR per il caso con la prima iniezione fissata a 50 deg BTDC e la seconda a 10 deg ATDC. Per brevità, sono stati presentati solo i risultati delle simulazioni aventi il 70% e l'80% della massa totale iniettata durante la prima iniezione e frazioni estreme di EGR (0% e 20%). Questa strategia è stata presa come rappresentativa per mostrare l'effetto del ricircolo dei gas sulla combustione visto che è stata verificata la stessa tendenza in tutte le strategie simulate.

Aumentando la frazione EGR, sia le reazioni a bassa temperatura (LTR) relative al numero di ottano del carburante diesel sia le reazioni ad alta temperatura (HTR) sono caratterizzate da valori di picco inferiori per il rilascio di calore, nonché un ritardo durante la combustione. Infatti, mantenendo costante la temperatura della carica di aspirazione, gli effetti dell'EGR sulla combustione HCCI sono riconducibili principalmente a due fenomeni: in primo luogo, la capacità termica della miscela aumenta con l'aumento del tasso di EGR. Come risultato, l'aumento di pressione durante la corsa di compressione è minore in confronto alle condizioni di basso o nullo EGR. In secondo luogo, la presenza dei prodotti di reazione della EGR (come CO, CO₂,

NO, H₂O) limita la velocità delle reazioni dirette di ossidazione e promuove le reazioni inverse. L'integrazione di tutti questi effetti ha come risultato un ritardo del manifestarsi del fenomeno delle fiamme fredde. Di conseguenza, si rileva un ritardo nei tempi di combustione nei motori HCCI. Ciò significa che l'EGR aiuta a ritardare l'inizio della combustione, aumentando il tempo di miscelazione del combustibile e quindi l'omogeneità della carica. Oltre all'aumento del calore specifico della miscela che aiuta a ridurre i picchi di temperatura e la concentrazione di NO_x, questo è un ulteriore vantaggio nell'utilizzare il ricircolo dei gas di scarico per i motori HCCI.

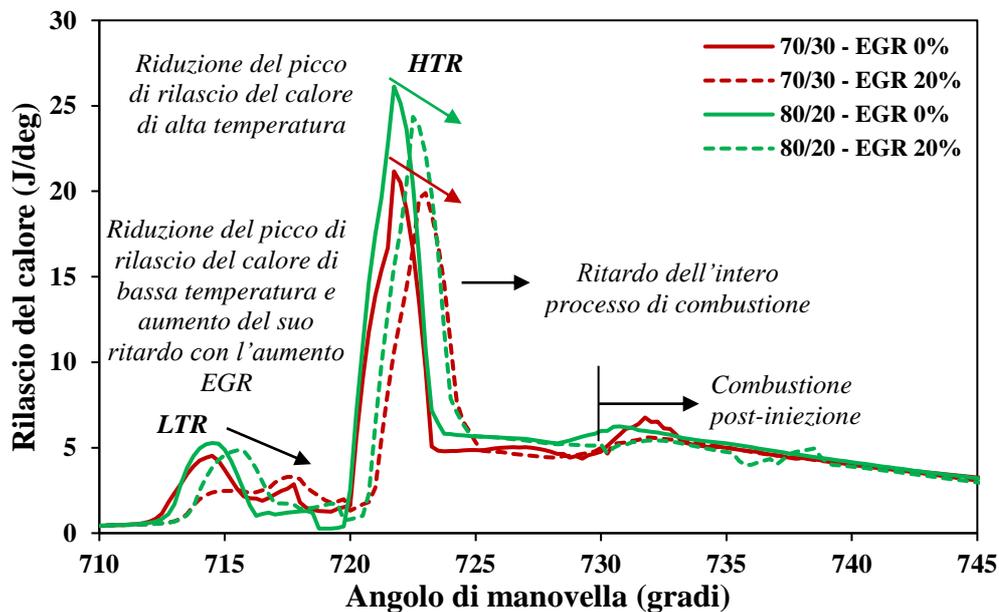


Figura 7.1 Andamenti dell'HRR: strategia di iniezione -50 BTDC/+10 ATDC, 70/30 e 80/20 prima e seconda percentuale di massa iniettata, 0%/20% EGR.

Inoltre, la Figura 7.1 evidenzia come la minor concentrazione di ossigeno produce un rilascio più graduale di calore durante la fase di post combustione rispetto a strategie senza EGR.

La Figura 7.2 riassume quanto detto sopra in termini di ritardo di accensione per la strategia di iniezione precedente (-50 BTDC/+10 ATDC) per tutte le simulazioni ad essa associate, ovvero in funzione della frazione di EGR e della massa associata al primo impulso. Per quanto riguarda quest'ultimo parametro, quando una maggiore quantità di gasolio viene introdotto attraverso il primo impulso, l'istante di accensione è ritardato poiché le fasi di riscaldamento ed evaporazione producono una forte diminuzione della temperatura del gas all'interno del cilindro.

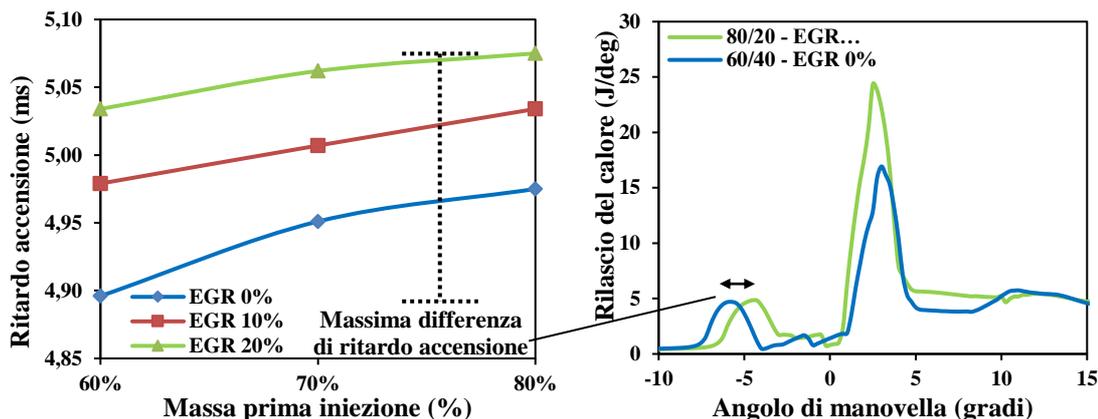


Figura 7.2 a) Ritardo all'accensione in funzione della massa della prima iniezione e della frazione di EGR; b) confronto tra gli andamenti dell'HRR per i casi aventi minimo e massimo ignition delay.

7.3 Emissioni NO_x e incombusti

Per quanto riguarda la produzione di NO , è noto che l'utilizzo del ricircolo dei gas combusti ne riduce la concentrazione dato che all'interno della camera di combustione è disponibile una minor quantità di ossigeno per l'ossidazione.

La Figura 7.3 mostra la correlazione tra la concentrazione degli NO prodotti e le temperature nel cilindro per i casi di Diesel convenzionale ed iniezione splittata -50 BTDC/+5 ATDC per tutte le tre frazioni di EGR indagate. Come già detto nel paragrafo precedente, questa analisi non si può basare solo sul valore numerico della temperatura media nella camera, ma è necessario indagarne la struttura e il relativo contour per studiare l'effetto dei picchi presenti.

Si può notare come il volume della camera interessato da temperature oltre i 2000 K vada a ridursi nei casi di iniezione multipla rispetto all'iniezione singola nel caso di strategia convenzionale. Inoltre si può vedere come i valori estremi della scala delle temperature del contour vadano a ridursi man mano che aumenta la frazione di EGR fissata. Il maggiore calore specifico, unito alla minor presenza di ossigeno messo a disposizione, determina l'abbassamento sia della temperatura media che dei valori massimi. Queste minori temperature presenti in camera di combustione determinano la minor formazione di NO . Per di più, la minore presenza di ossigeno, limita non solo la combustione, ma anche le reazioni connesse alla formazione dei composti azotati.

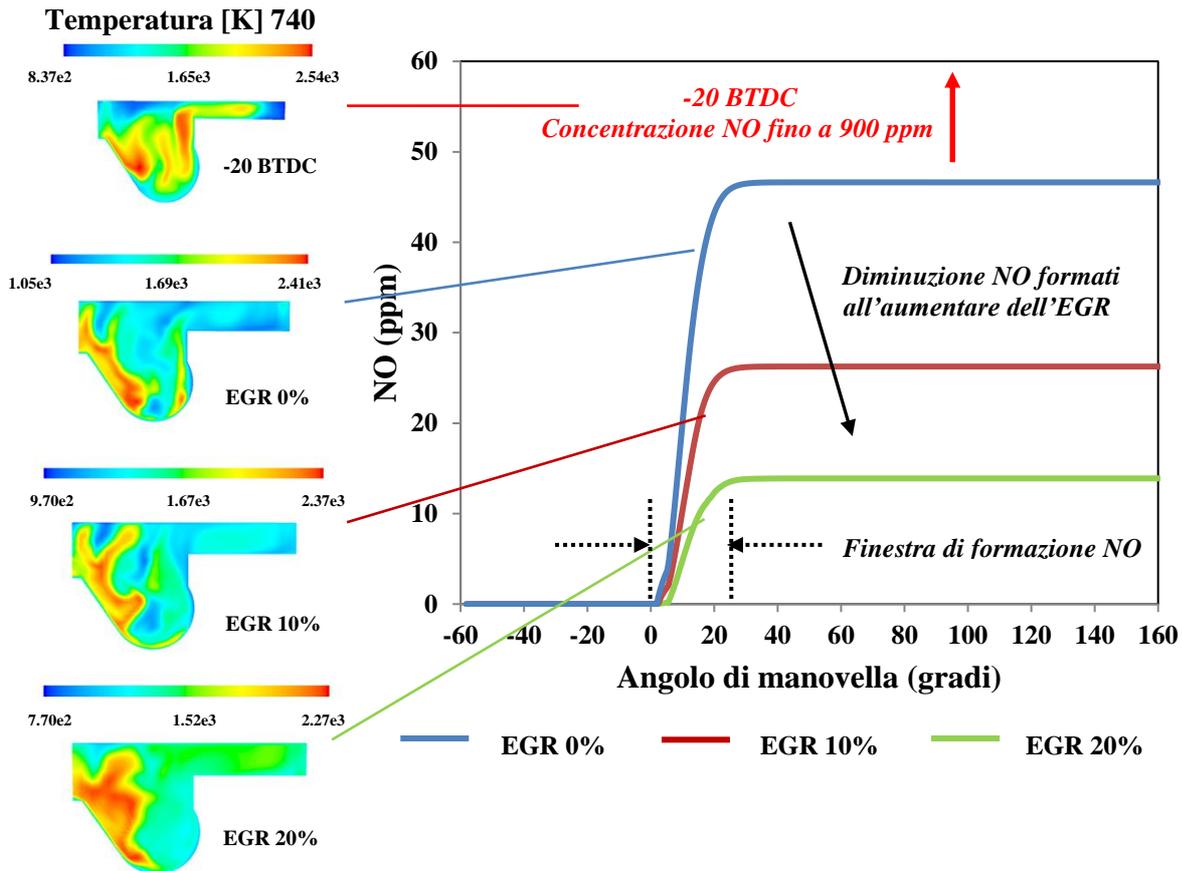


Figura 7.3 Correlazione tra la concentrazione di NO e la temperatura nel cilindro a 740 CA, al variare dell'EGR (fasatura -50 deg BTDC / +5 deg ATDC).

Si può vedere dalla Figura 7.4 (che mostra le iso-temperature a 1700 K colorate in base alla concentrazione di NO a 740 CA per i casi sopra trattati), le concentrazioni di NO siano drasticamente ridotte all'aumentare dell'EGR. Questo effetto del ricircolo è stato riscontrato in tutti i casi studiati, tanto che si possono ritenere quasi trascurabili le emissioni di NO per il 60% dei casi totali studiati. Anche qui come fatto in precedenza, considerando la temperatura di 1700 K come rappresentativa del fronte di fiamma, si nota come la sua estensione vada progressivamente a ridursi dal diesel convenzionale alle strategie iniezione multipla anche grazie all'aumento della frazione di EGR utilizzata. Si vede come per la stessa strategia di iniezione (fasatura e massa) all'aumentare dell'EGR il valore massimo nella scala della frazione in massa di NO vada a ridursi, tanto da arrivare ad essere un ordine di grandezza inferiore rispetto al caso di Diesel convenzionale.

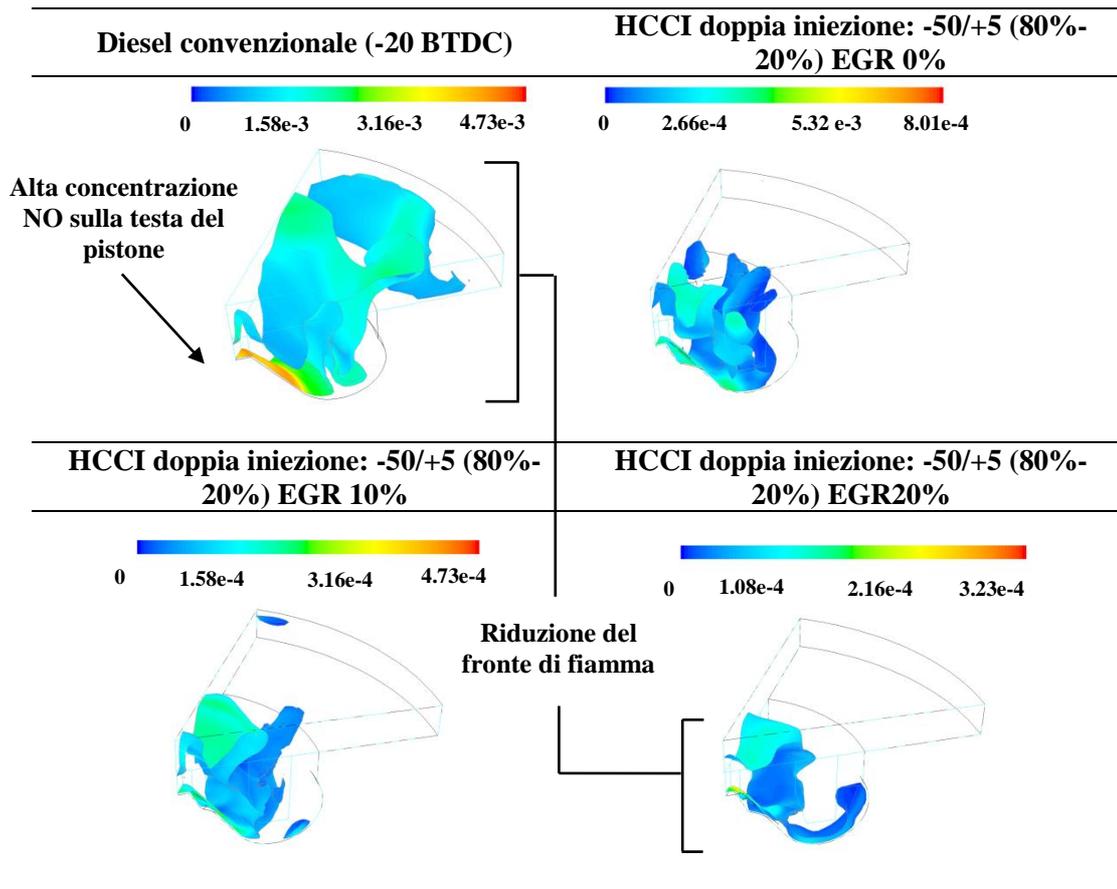
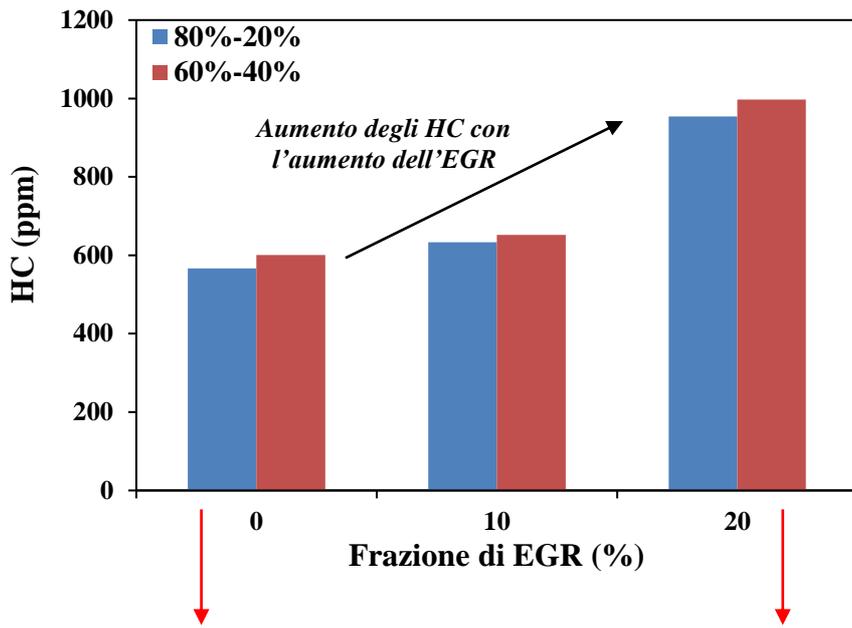
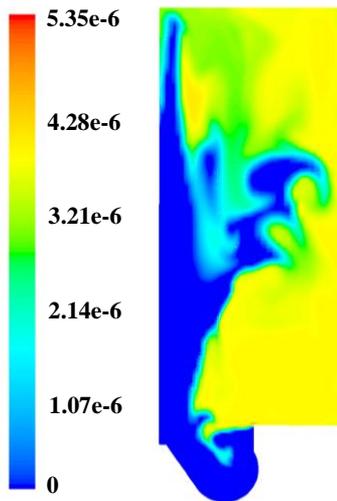


Figura 7.4 Superfici iso-temperatura a 1700 K colorate in base alla frazione di NO: confronto tra diversi regimi di combustione.

Uno svantaggio derivante dall'utilizzo del ricircolo dei gas combusti sta nell'aumento degli idrocarburi parzialmente combusti presenti allo scarico. In Figura 7.5 sono mostrate le concentrazioni finali di tali specie presenti all'*Exhaust Valve Open* per il caso di fasatura di iniezione -50 BTDC/+10 ATDC al variare della frazione di EGR utilizzata e per valori estremi di ripartizione della massa tra le iniezioni (80% - 20% e 60% - 40%). La quantità di idrocarburi incombusti è calcolata come la somma delle specie incombuste presenti allo scarico, tra quelle maggiormente presenti troviamo: CH_3 , CH_4 , C_2H_5 e C_3H_5 .



HCCI doppia iniezione:
-50/+10 con 80%-20% EGR 0%



HCCI doppia iniezione:
-50/+10 con 60%-40% EGR 20%

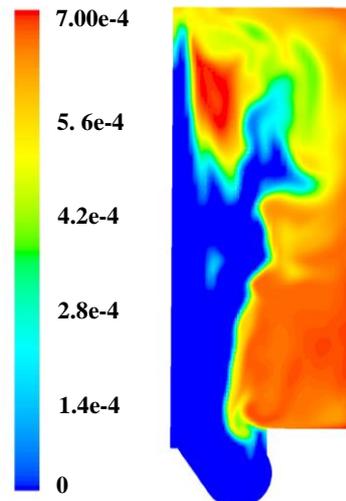


Figura 7.5 Concentrazione di HC allo scarico: valori di frazione molare e mappe interne al cilindro (CH_4) al variare dell'EGR per iniezione multipla -50 BTDC/+10 ATDC.

Focalizzando l'attenzione su una strategia di iniezione, la figura mostra come all'aumentare dell'EGR la quantità di incombusti presenti allo scarico va ad aumentare. Questo è dovuto principalmente alla presenza di una minor quantità di ossigeno nella camera rispetto al caso di assenza di EGR, che quindi impedisce la completa ossidazione dei prodotti di combustione intermedi. Un aumento di incombusti prodotti si ha anche all'aumentare della massa iniettata nella seconda iniezione. Questo comportamento è dovuto alla maggiore quantità di combustibile immesso nella

iniezione di post combustione che ne annichilisce l'effetto principale di riduzione delle emissioni di incombusti.

Nella figura vengono inoltre confrontate le mappe interne al cilindro della concentrazione di CH_4 all'apertura dello scarico per i casi più estremi. Come riferimento è stato preso questo composto dato che è quello che maggiormente costituisce gli incombusti nei casi trattati. È possibile vedere che i valori massimi della scala sono decisamente differenti, così come i colori della mappa interna che rispecchiano appieno i valori finali di frazione volumica di incombusti sopra riportati.

7.4 Prestazioni

Un altro vantaggio dell'utilizzare il ricircolo dei gas esausti è quello dell'incremento della pressione media indicata. È stato infatti rilevato per tutti i casi esaminati un valore di IMEP sempre maggiore all'aumentare della frazione di EGR. In Figura 7.6 è possibile vedere questo comportamento per il caso di iniezione multipla con prima iniezione 50 gradi prima del punto morto superiore, per tutte le fasature della seconda iniezione. Come è stato detto in precedenza, mentre per alcuni casi di iniezione multipla con prima iniezione a 60 deg BTDC si è verificato un incremento nella IMEP, per i casi con prima iniezione 50 deg BTDC (Figura 6.23) si è verificato un abbassamento della pressione indicata facendo il confronto tra la strategia a singola iniezione e quella con iniezione multipla. Questo è dovuto, come già è stato detto, al minor rilascio di calore durante la fase di combustione principale, causato dalla minor quantità di combustibile immesso nella fase di premiscelazione. Nella Figura 7.6 è possibile vedere che la pressione indicata è minore per tutte le fasature della seconda iniezione nel caso di EGR pari allo 0% rispetto al caso di singola iniezione HCCI. Si nota però l'aumento della IMEP con l'aumento della frazione di EGR utilizzata. Si può vedere come nel caso di EGR pari al 20%, vi sia un recupero totale della pressione indicata rispetto al caso di motore con singola iniezione per due casi su quattro. Ciò è dovuto principalmente al maggior calore specifico del fluido che, nonostante aumenti il lavoro di compressione, aumenta anche il lavoro utile durante la fase di espansione e in questo caso l'aumento del secondo è maggiore del primo, comportando un beneficio per quanto riguarda le prestazioni.

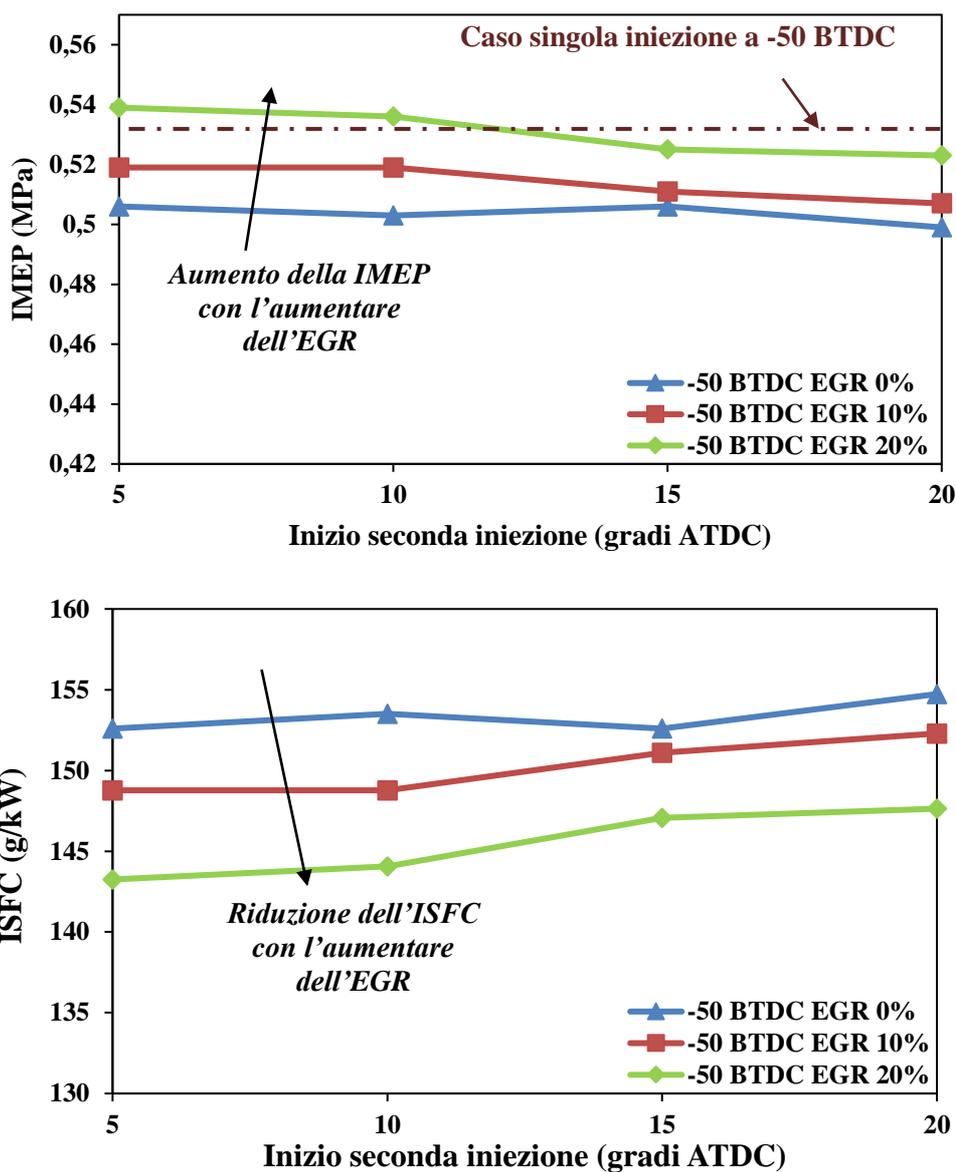


Figura 7.6 Effetto delle strategie con ricircolo dei gas esausti sulla IMEP e ISFC.

L'aumento della pressione indicata provoca un aumento di potenza e quindi una riduzione del consumo specifico. In Figura 7.6 è possibile vedere anche questa ricaduta con l'aumentare della frazione di gas combusti ricircolati nella camera di combustione.

Bibliografia

- [1] Kokjohn S.L., Reitz R.D., “A computational investigation of two-stage combustion in a light-duty engine”, SAE International, 2003.
- [2] Christensen M. et al., “Supercharged homogeneous charge compression ignition”, SAE Technical Paper No. 980787, 1998.
- [3] Wang X., Huang Z., Kuti O. A., Zhang W., Nishida K., “Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra high injection pressure”, *International Journal of heat and fluid flow* 31, 659-666, 2010.
- [4] He C., Ge Y., Tan J., Han X., “Spray properties of alternative fuels: a comparative analysis of biodiesel and diesel”, *International Journal of energy research* 32, 1329-1338, 2008.
- [5] Morgan R., Wray J., Kennaird D.A., Crua C., Heikal M.R., “The influence of injection parameters on the formation and break-up of a diesel spray”, SAE Technical paper 2001-01-0529, 2001.
- [6] Im K.S., Cheong S.K., Powell C.F., Liu X., Wang J., “Effect of internal cavitation on break-up of high pressure diesel spray”, 11th Triennial International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, Colorado USA, July 2009.
- [7] Patouna S.. “A CFD study of cavitation in real size diesel injector”, PhD thesis, Universitat Politecnica de Valencia, 2012.
- [8] Som S., Ramirez A., Longman D.E., Aggarwal S.K., “Effect of nozzle orifice geometry on spray combustion and emission characteristics under diesel engine conditions”, *Fuel* 90 1267-1276, 2011.
- [9] Park S.H., Suh H.K., Lee C.S., “Effect of cavitating flow on the flow and fuel atomization characteristics of biodiesel and diesel fuels”, *Energy and fuels* 22 605-613, 2008.
- [10] Payri R., Salvador F.J., Gimeno J., Zapata L.D., “Diesel nozzle geometry influence on spray liquid-phase fuel penetration in evaporative conditions”, *Fuel* 87 1165-1176, 2008.
- [11] Hentschel W., Ritcher J., “Time-Resolved analysis of soot formation and oxidation in a Directed-Injection diesel engine for different EGR rates by an extinction method”; SAE paper 952517, 1995.

Conclusioni

Il lavoro è stato suddiviso in due gradi parti.

Nella prima, sono stati indagati i fenomeni che intervengono durante lo spray del combustibile diesel. In particolare lo studio è stato innanzitutto dedicato alla previsione dell'effetto della cavitazione presente nel flusso interno agli ugelli degli iniettori di un comune motore diesel; successivamente è stata descritta la morfologia dello spray, discutendo molte delle caratteristiche principali che lo contraddistinguono. Questo approccio di tipo quasi-dinamico è stato utilizzato per studiare l'intera fase di iniezione di diesel per diverse pressioni di iniezione e densità dell'aria ambiente. Tutti i risultati numerici sono stati supportati da un ottimo confronto con i dati sperimentali e ha rivelato che le proprietà fisiche del carburante svolgono un ruolo importante sulla atomizzazione dello spray. In particolare, è stato verificato che:

- l'elevata pressione di vapore del diesel comporta la presenza della cavitazione nell'intero ugello dell'iniettore. Questo è un grande vantaggio in termini di atomizzazione poiché la cavitazione promuove il break-up dello spray.
- la bassa viscosità del diesel (rispetto al biodiesel) ha un duplice effetto. Innanzitutto, aumenta la velocità di scarico in modo che, nonostante il diesel sia caratterizzato da una diminuzione di densità dovuta alla estensione della cavitazione fino alla sezione finale del ugello, la portata di massa sia comunque superiore. In secondo luogo, si può notare un valore dell'energia cinetica turbolenta maggiore con ulteriori benefici sul break-up all'interno della camera di combustione.

I risultati sopra riportati hanno il loro impatto sulla morfologia del getto. Lo studio al variare delle pressioni di iniezione e delle densità dell'aria ambiente, ha dato risultati coerenti con gli studi presenti in letteratura, in termini delle grandezze studiate: penetrazione massima, angolo del cono e diametro medio di Sauter.

La seconda parte del lavoro si è concentrata sul confronto tra le strategie di combustione di un motore diesel convenzionale e quella HCCI per un motore diesel light-duty. Alcune caratteristiche tecniche (quali il rapporto di compressione, l'angolo compreso tra gli spray dell'iniettore e la forma del bowl del pistone) sono stati modificati per facilitare la formazione della carica all'interno della camera di combustione e impedire l'accensione prematura della miscela.

Ci si è innanzitutto concentrati sulle strategie di iniezione singola. Rispetto alla singola fase dell'iniezione dei diesel convenzionali, l'operazione HCCI può diminuire progressivamente le emissioni di NO con l'aumentare dell'anticipo dell'iniezione del carburante, fino a renderne le concentrazioni quasi trascurabili. Tuttavia, per iniezioni anche molto precoci (cioè -60 BTDC), questo vantaggio è accompagnato da un aumento degli incombusti a causa della parziale formazione della miscela fuori dalla camera di combustione. Questo porta alla diminuzione della pressione media indicata e all'aumento del consumo specifico. È stato dimostrato che questo fattore negativo può essere limitato attraverso l'uso di strategie con doppia iniezione e l'impiego dell'EGR.

Tuttavia, possono essere ottenuti altri benefici attraverso questo approccio. Infatti, l'adozione di un'iniezione precoce e una tardiva può anche ridurre ulteriormente le emissioni di NO. L'iniezione del secondo impulso 10 gradi dopo il punto morto superiore consente di ridurre drasticamente le emissioni per il primo impulso di iniezione 50 deg BTDC e per qualsiasi quantità di combustibile associato ai due impulsi. Attraverso le stesse strategie, è stata ottenuta una ulteriore riduzione anche fissando il primo impulso a 60 deg BTDC in confronto con l'iniezione singola. La presente analisi ha mostrato che questi risultati possono essere direttamente correlati al diagramma della velocità di rilascio del calore. Le iniezioni multiple riescono a fornire un rilascio graduale di calore che porta ad una riduzione della temperatura massima nel cilindro e, quindi, alla riduzione ulteriore di NO.

Un ulteriore miglioramento è stato ottenuto introducendo il ricircolo dei gas esausti. Infatti tramite l'EGR si può controllare in modo migliore l'autoaccensione della carica, così da poter aumentare il ritardo all'ignizione e ottimizzare la miscelazione della stessa. Tale risultato è stato evidenziato studiando i diagrammi di rilascio del calore per i diversi casi trattati. Sfruttando l'EGR si limitano i picchi di temperatura dato che si mette a disposizione minor quantità di ossigeno per bruciare, e si riesce quindi a rendere quasi del tutto trascurabili le emissioni di ossidi di azoto per più del 60% dei casi trattati. Infine, l'uso del ricircolo dei gas si è dimostrato utile anche per aumentare la pressione indicata, ridurre il consumo specifico e riportare così il motore ad avere le stesse prestazioni del caso di singola iniezione anticipata.

Un simile studio eseguito su questa tipologia di combustione innovativa suscita molto interesse nei moderni motori diesel. Infatti, sfruttando l'iniezione diretta nella

camera di combustione, si può riuscire ad implementare tale strategia HCCI anche nei motori tradizionali. I problemi connessi alla combustione HCCI che tuttavia restano ancora da affrontare riguardano principalmente:

- l'estensione del campo di operatività della combustione stessa che oggi è confinata ai bassi carichi e bassi regimi a causa dei lunghi tempi di miscibilità che il diesel ha nell'aria ambiente;
- l'ottimizzazione del controllo dell'inizio della combustione tramite EGR con valori più elevati e con innovativi sistemi di iniezione multi iniettore;
- realizzazione di centraline di controllo adeguate utili per poter passare dal regime HCCI al regime diesel convenzionale rapidamente e con il minor impatto su prestazioni, consumi e emissioni inquinanti.

Appendice A

Di seguito viene presentato il codice cinetico della chimica di combustione del Diesel, sviluppato e testato appositamente per motori HCCI dall'*Engine Research Center* (ERC).

elements

h c o n

end

species

nc7h16	o2	n2	co2	h2o	co	h2
oh	h2o2	ho2	h	o	ch3o	ch2o
hco	ch2	ch3	ch4	c2h3	c2h4	c2h5
c3h4	c3h5	c3h6	c3h7	c7h15-2	c7h15o2	c7ket12
c5h11co						

end

reactions

nc7h16 + h	= c7h15-2 + h2	4.380e+07	2.0	4760.0
nc7h16 + oh	= c7h15-2 + h2o	9.700e+09	1.3	1690.0
nc7h16 + ho2	= c7h15-2 + h2o2	1.650e+13	0.0	16950.0
nc7h16 + o2	= c7h15-2 + ho2	2.000e+15	0.0	47380.0
c7h15-2 + o2	= c7h15o2	1.560e+12	0.0	0.0
c7h15o2 + o2	= c7ket12 + oh	4.500e+14	0.0	18232.712
c7ket12	= c5h11co + ch2o + oh	9.530e+14	0.0	4.110e+4
c5h11co	= c2h4 + c3h7 + co	9.84e+15	0.0	4.02E+04
c7h15-2	= c2h5 + c2h4 + c3h6	7.045e+14	0.0	3.46E+04
c3h7	= c2h4 + ch3	9.600e+13	0.0	30950.0
c3h7	= c3h6 + h	1.250e+14	0.0	36900.0
c3h6 + ch3	= c3h5 + ch4	9.000e+12	0.0	8480.0
c3h5 + o2	= c3h4 + ho2	6.000e+11	0.0	10000.0
c3h4 + oh	= c2h3 + ch2o	1.000e+12	0.0	0.0
c3h4 + oh	= c2h4 + hco	1.000e+12	0.0	0.0
ch3 + ho2	= ch3o + oh	5.000e+13	0.00	0.
ch3 + oh	= ch2 + h2o	7.500e+06	2.00	5000.
ch2 + oh	= ch2o + h	2.500e+13	0.00	0.
ch2 + o2	= hco + oh	4.300e+10	0.00	-500.
ch2 + o2	= co2 + h2	6.900e+11	0.00	500.
ch2 + o2	= co + h2o	2.000e+10	0.00	-1000.
ch2 + o2	= ch2o + o	5.000e+13	0.00	9000.
ch2 + o2	= co2 + h + h	1.600e+12	0.00	1000.
ch2 + o2	= co + oh + h	8.600e+10	0.00	-500.
ch3o + co	= ch3 + co2	1.570e+14	0.00	11800.
co + oh	= co2 + h	8.987e+07	1.38	5232.877

o	+ oh	= o2	+ h	4.000e+14	-0.50	0.	
h	+ ho2	= oh	+ oh	1.700e+14	0.0	875.	
oh	+ oh	= o	+ h2o	6.000e+08	1.30	0.	
h	+ o2	+ m	= ho2	+ m	3.600e+17	-0.72	0.
	h2o/21./	co2/5.0/	h2/3.3/	co/2.0/			
h2o2	+ m	= oh	+ oh	+ m	1.000e+16	0.00	45500.
	h2o/21./	co2/5.0/	h2/3.3/	co/2.0/			
h2	+ oh	= h2o	+ h	1.170e+09	1.30	3626.	
ho2	+ ho2	= h2o2	+ o2	3.000e+12	0.00	0.	
ch2o	+ oh	= hco	+ h2o	5.563e+10	1.095	-76.517	
ch2o	+ ho2	= hco	+ h2o2	3.000e+12	0.00	8000.	
hco	+ o2	= ho2	+ co	3.300e+13	-0.40	0.	
hco	+ m	= h+co	+ m	1.591e+18	0.95	56712.329	
ch3	+ ch3o	= ch4	+ ch2o	4.300e+14	0.00	0.	
c2h4	+ oh	= ch2o	+ ch3	6.000e+13	0.0	960.	
c2h4	+ oh	= c2h3	+ h2o	8.020e+13	0.00	5955.	
c2h3	+ o2	= ch2o	+ hco	4.000e+12	0.00	-250.	
c2h3	+ hco	= c2h4	+ co	6.034e+13	0.0	0.	
c2h5	+ o2	= c2h4	+ ho2	2.000e+10	0.0	-2200.	
ch4	+ o2	= ch3	+ ho2	7.900e+13	0.00	56000.	
oh	+ ho2	= h2o	+ o2	7.50E+12	0.0	0.	
ch3	+ o2	= ch2o	+ oh	3.80E+11	0.0	9000.	
ch4	+ h	= ch3	+ h2	6.600e+08	1.60	10840.	
ch4	+ oh	= ch3	+ h2o	1.600e+06	2.10	2460.	
ch4	+ o	= ch3	+ oh	1.020e+09	1.50	8604.	
ch4	+ ho2	= ch3	+ h2o2	9.000e+11	0.00	18700.	
ch4	+ ch2	= ch3	+ ch3	4.000e+12	0.00	-570.	
c3h6		= c2h3	+ ch3	3.150e+15	0.0	85500.0	

end

Appendice B

Di seguito viene presentato il codice per il calcolo della velocità di formazione degli NO_x.

```
# include "udf.h"
DEFINE_NOX_RATE(NOx_code, c, t, Pollut, Pollut_Par, NOx)
{
  real kf1,kr1,kf2,kr2,kf3,kr3;
  real o_Conc, oh_Conc, n2_Conc, n_Conc, o2_Conc, no_Conc, h_Conc;
  real Temp;
  real rf, rr;
  POLLUT_FRATE(Pollut) = 0.;
  POLLUT_RRATE(Pollut) = 0.;

  /* Computing the Cell Temperature */
  Temp = C_T(c,t);
  /* Computing the O concentration */
  o_Conc = MOLECON(Pollut, O);
  /* Computing the OH concentration */
  oh_Conc = MOLECON(Pollut, OH);
  /* Computing the N2 concentration */
  n2_Conc = MOLECON(Pollut, N2);
  /* Computing the N concentration */
  n_Conc = MOLECON(Pollut, N);
  /* Computing the O2 concentration */
  o2_Conc = MOLECON(Pollut, O2);
  /* Computing the NO concentration */
  no_Conc = MOLECON(Pollut, IDX(NO));
  /* Computing the H concentration */
  h_Conc = MOLECON(Pollut, H);

  kf1 = 1.80e8*exp(-38370.0/Temp);
  kr1 = 3.80e7*exp(-425/Temp);
  kf2 = 1.80e4*Temp*exp(-4680.0/Temp);
  kr2 = 3.80e3*Temp*exp(-20820.0/Temp);
  kf3 = 7.1e7*exp(-450.0/Temp);
  kr3 = 1.7e8*exp(-24560.0/Temp);

  /* Computing the NO rate */
  /* Forward reaction rate */
  rf = (kf1*o_Conc*n2_Conc+kf2*n_Conc*o2_Conc+kf3*n_Conc*oh_Conc);
  /* Backward reaction rate */
  rr = (kr1*no_Conc*n_Conc+kr2*no_Conc*o_Conc+kr3*no_Conc*h_Conc);
  POLLUT_FRATE(Pollut) += rf;
  POLLUT_RRATE(Pollut) += -rr;
}
```


Ringraziamenti