

# APPROCCI ALL'INCORPORAZIONE DI MECCANISMI DI COMBUSTIONE DETTAGLIATI PER LA SIMULAZIONE MULTIDIMENSIONALE DEI MOTORI A COMBUSTIONE INTERNA

*Giuseppe Cantore, Federico Perini*

Dipartimento di Ingegneria Meccanica e Civile  
Università di Modena e Reggio Emilia  
strada Vignolese, 905/B - 41125 Modena (MO), Italia  
[giuseppe.cantore@unimore.it](mailto:giuseppe.cantore@unimore.it), [federico.perini@unimore.it](mailto:federico.perini@unimore.it)

## SOMMARIO

Lo sviluppo di modalità di combustione innovative per l'alimentazione dei motori a combustione interna, e l'impiego di combustibili alternativi, ambientalmente sostenibili, richiedono sempre migliore conoscenza della composizione e della reattività locali della miscela in camera di combustione. In questo articolo sono presentati due differenti approcci di calcolo, studiati per consentire un impiego computazionalmente efficiente di meccanismi di cinetica chimica in simulazioni multidimensionali di combustione nei motori. Il primo approccio coinvolge lo sviluppo di meccanismi di reazione ridotti ed ottimizzati, tarati per condizioni operative tipiche dei motori a combustione interna. Il secondo approccio è invece indirizzato alla simulazione del sistema di equazioni differenziali che descrive la cinetica chimica di combustione, e coinvolge lo sviluppo analitico di matrici Jacobiane in forma sparsa. Lo sfruttamento delle tecniche presentate può consentire l'impiego di meccanismi di combustione con centinaia di specie, in tempi di calcolo ridotti anche di due ordini di grandezza rispetto agli approcci tradizionali.

## 1. INTRODUZIONE

Nonostante possieda più di 4000 secoli di storia, la combustione è ancora ad oggi la tecnologia maggiormente impiegata per la conversione di energia su scala mondiale, in percentuali che sono stimate tra il 75% ed il 90%. La ancora crescente richiesta energetica su scala globale si sta tuttavia confrontando con seri problemi di sostenibilità ambientale; in questo contesto, lo sviluppo più probabile è quello di una diversificazione di approvvigionamento da varie fonti energetiche. Per quanto riguarda il sistema dei trasporti, si prevede una progressiva sostituzione dei combustibili tradizionali derivati dal petrolio con biocombustibili, ed un graduale affiancamento di sistemi di propulsione elettrici ai tradizionali motori a combustione interna. Questo scenario ha promosso, a partire dai primi anni Duemila, lo studio di nuove modalità di combustione per i motori a combustione interna, che combinassero un sensibile incremento in termini di efficienza energetica a riduzioni significative nella produzione di inquinanti. Ad esempio, la combustione ad accensione per compressione, quando a carica omoge-

nea (HCCI, *homogeneous-charge compression ignition*), a carica parzialmente premiscelata (PCCI, *partially-premixed charge compression ignition*), o determinata dalla reattività della miscela (RCCI, *reactivity-controlled compression ignition*), può consentire una efficienza nel ciclo indicato anche del 60%, ed emissioni inquinanti che rispettino le normative EURO 5 anche in assenza di dispositivi di post-trattamento (Kokjohn et al., 2011).

Si tratta di modalità di combustione che fondano la propria efficacia su una distribuzione non omogenea dei combustibili (anche multipli) e della dosatura della miscela in camera, e che si sviluppano in modo fortemente correlato alle condizioni locali di reattività, nonché alla composizione chimica del combustibile stesso. Per queste ragioni, i modelli di combustione fenomenologici/semplificati, impiegati con successo nello studio della combustione ad accensione comandata e della combustione Diesel ad iniezione diretta, risultano inadeguati. Essi non sono infatti in grado di rappresentare correttamente l'intera gamma di condizioni operative che possono verificarsi in camera, anche a bassa temperatura ed a valori molto bassi del rapporto di equivalenza; né di prevedere l'interazione di queste condizioni con percentuali elevate di EGR. Non sono inoltre in grado di modellare la presenza in camera di combustione di più di un combustibile, o di combustibili che posseggano composizione chimica variabile (ad esempio, numerosi composti per il biodiesel, miscele di benzina ed etanolo, o anche gasoli tradizionali con differenti numeri di cetano) (Lu e Law, 2009).

Per queste ragioni, la modellazione dei motori alternativi, operati mediante modalità di combustione complesse, non può prescindere dall'accoppiamento della fluidodinamica interna al cilindro con la cinetica chimica della miscela di aria e combustibile. Tipicamente, il sistema di equazioni che descrivono la conservazione della massa e dell'energia in ciascuna cella del dominio computazionale, dovute alla presenza di reazioni chimiche, interagisce con il solutore del campo di moto turbolento in modo indiretto, all'interno di una strategia di *operator splitting*. Ad esempio (Torres e Trujillo, 2006), nelle equazioni (1) i termini dovuti alla cinetica chimica sono modellati come sorgenti di massa per le specie e di energia termica per la cella, all'interno della risoluzione delle equazioni di Navier-Stokes:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_i}{\partial t} &= -\nabla \cdot (Y_i \mathbf{v}) - \nabla \cdot Y_i \mathbf{v}_{d,i} + \frac{1}{\rho} \dot{\omega}_i W_i, \\ \frac{\partial E}{\partial t} &= -\nabla \cdot (E \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\mathbf{v} \bar{\mathbf{T}}) - \nabla \cdot (\dot{\mathbf{Q}} + \dot{\mathbf{Q}}_r) + v \cdot \sum_j m_j \mathbf{a}_j + \sum_j v_{d,i} \cdot m_j \mathbf{a}_j. \end{aligned} \quad (1)$$

In virtù di questa configurazione, l'evoluzione della concentrazione delle specie a causa delle reazioni chimiche in ogni cella del dominio computazionale può essere calcolata in modo indipendente; ogni cella è infatti modellata come un reattore chiuso a volume costante, perfettamente omogeneo, ed adiabatico. Dal punto di vista computazionale, la mancanza di comunicazione tra le celle rappresenta un vantaggio significativo, in quanto il problema (solitamente definito come *embarassingly parallel*) può essere risolto su architetture di calcolo parallelo in modo molto efficiente. Tuttavia, le specie chimiche coinvolte in un sistema di reazioni tipicamente coinvolgono numerose scale temporali, e la loro evoluzione può completarsi in tempi caratteristici che variano di numerosi ordini di grandezza (da circa  $10^{-15}$  s fino all'ordine di alcuni ms). Questo grado di *stiffness* (o 'rigidezza') del sistema comporta una sostanziale difficoltà di integrazione temporale delle concentrazioni delle specie, al punto che il tempo dedi-

cato alla soluzione della cinetica chimica in problemi di flussi multidimensionali come quelli dei motori a combustione interna può superare il 90% del tempo totale di simulazione.

Complessivamente, l'architettura di calcolo necessaria a simulare la fluidodinamica di miscele gassose, spray, ed in presenza di reazioni chimiche, può essere schematizzata come in Figura 1. Nel presente articolo, sono presentati due approcci computazionali, che agiscono su due dei blocchi costitutivi della simulazione di Figura 1: rispettivamente, il meccanismo di combustione e l'accoppiamento tra integratore e pacchetto di simulazione della cinetica chimica. Entrambi sono volti a rendere possibile, per l'applicazione in motori a combustione interna, la simulazione della cinetica chimica come mezzo per prevedere la corretta formazione delle specie, il rilascio di energia termica a bassa (*cool flame*) ed alta temperatura, la formazione degli inquinanti. Il primo approccio è indirizzato verso la definizione del meccanismo di combustione, quale compromesso ottimale tra un numero di reazioni e di specie il più ridotto possibile, ed un ambito di validità completo per le condizioni operative tipiche dei motori a combustione. Il secondo approccio è invece rivolto all'accoppiamento tra una libreria cinetica che valuti le proprietà delle miscele e i tassi di reazione, e l'integratore del sistema di equazioni differenziali ordinarie (EDO) ad essi associato, e sfrutta la possibilità di derivare una formulazione analitica per la matrice di Jacobi associata al sistema, e di realizzarla in forma sparsa.

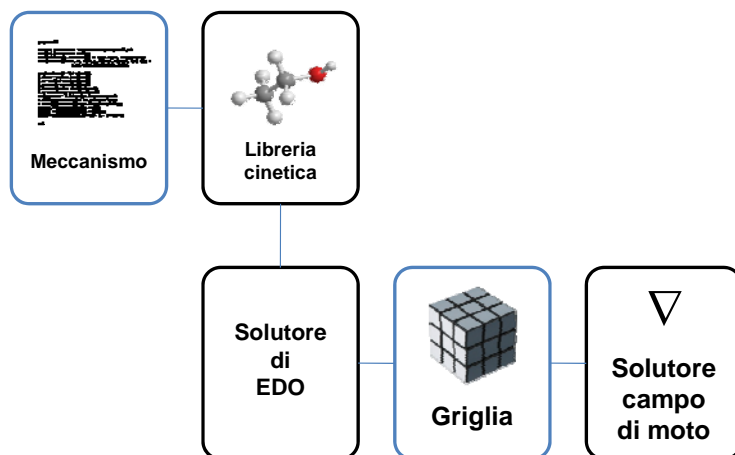


Fig. 1 – Schematizzazione dell'accoppiamento tra solutore del campo di moto e integratore della cinetica di combustione.

I dettagli degli approcci sviluppati sono riportati nei paragrafi a seguire.

## 2. MECCANISMI DI REAZIONE RIDOTTI ED OTTIMIZZATI

La Figura 2, tratta dalla Tesi di Dottorato rif. (Perini, 2011), mostra le dimensioni caratteristiche di un buon numero di meccanismi di reazione per la ossidazione di biocombustibili, sviluppati nel corso dell'ultimo decennio. Vi è una tendenza netta allo sviluppo di meccanismi che comprendano un numero sempre più elevato di specie (fino a circa 3000) e di reazioni (fino a circa 10000). Tali meccanismi sono necessari per la comprensione dei percorsi di reazione che consentono di collegare la dinamica delle specie più complesse allo sviluppo delle molecole più semplici, che rappresentano i prodotti tipici della combustione da ossidazione. Tuttavia, da un punto di vista industriale, la conoscenza di un livello di dettaglio così elevato non

è desiderabile, in quanto non fornisce informazioni significative al progettista, e rende più difficile la modellazione; tuttavia, è di fondamentale importanza che il meccanismo di reazione mantenga la capacità di simulare correttamente lo sviluppo termico – quindi, il profilo di temperatura -, nonché la evoluzione delle specie che governano la dinamica della combustione e la formazione degli inquinanti.

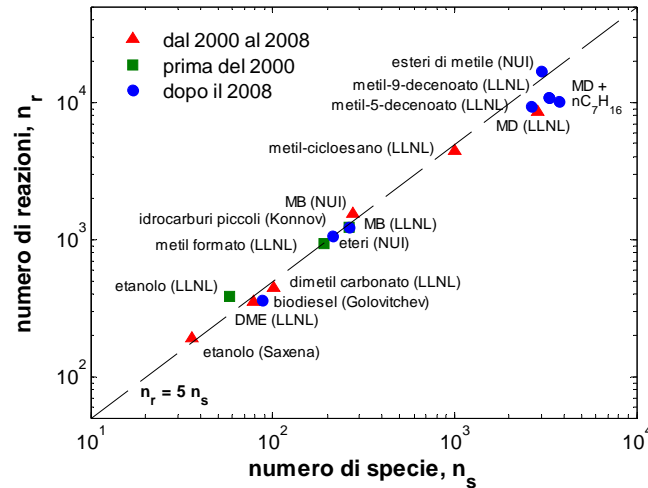


Fig. 2 – Dimensioni caratteristiche dei principali meccanismi di reazione per biocombustibili disponibili nella letteratura scientifica (tradotta da Perini, 2011).

È vasta la letteratura nel campo della riduzione dei meccanismi di combustione per simulazioni di interesse pratico; molti approcci, come per esempio il *directed relation graph* (DRG) (Lu e Law, 2005), la *element-flux analysis* (EF) (He et al., 2010), puntano alla identificazione di un sottoinsieme di specie più attive, che descriva il comportamento reattivo del sistema in modo sufficientemente accurato. Si tratta tuttavia di approcci ‘dinamici’ che modificano le dimensioni del meccanismo in ogni cella ed ad ogni passo di integrazione, con due possibili svantaggi: un primo legato alla non perfetta conservazione della massa, dovuta al ‘congelamento’ di talune specie; un secondo legato alla impossibilità di sviluppare un approccio specifico alla soluzione del sistema di equazioni della cinetica chimica, dato che le dimensioni di questo sistema, oltre che le interazioni tra le specie, non sono definite a priori. Sulla base di queste considerazioni, si è ritenuto opportuno sviluppare una metodologia volta a determinare un meccanismo di combustione definito e non variabile, che possieda tuttavia la capacità di modellare la combustione della miscela aria-combustibile in tutte le condizioni operative caratteristiche dei motori (alte pressioni, ampi intervalli di rapporto di equivalenza, ampia gamma di temperature).

**2.1 Definizione di una procedura iterativa.** La definizione di una dimensione ottimale del meccanismo di combustione non è stata fatta a priori; come accennato, le dimensioni dei meccanismi disponibili in letteratura possono variare da poche specie, ed alcune decine di reazioni, fino a migliaia di specie e decine di migliaia di reazioni chimiche. Per quanto riguarda il livello inferiore di dimensioni, tuttavia, è necessario osservare che i meccanismi essenziali (*skeletal*) sono solitamente in grado di prevedere unicamente il tempo dell’autoaccensione principale, ed a un limitato intervallo di rapporti di equivalenza. Per questo motivo, si è preferito imporre vincoli sul meccanismo ridotto non in termini di sue dimensioni, ma come problema di ottimizzazione volto a trovare il meccanismo più ridotto possibile, che verifichi de-

finiti requisiti di accuratezza richiesti a priori. Si è quindi definita una metodologia (Perini, 2011), (Perini et al., 2012), che sviluppi un meccanismo di reazione ridotto sulla base dei seguenti punti chiave:

- un meccanismo ridotto è definito a partire da un meccanismo di riferimento (‘completo’, o ‘dettagliato’) come suo sottoinsieme di specie e di reazioni;
- tecniche per la stima e la valutazione delle specie più reattive sono disponibili in letteratura (analisi di sensibilità, EF, DRG, ...)
- l’accuratezza di un meccanismo ridotto in confronto al meccanismo completo deve essere definita analiticamente, tramite una funzione di merito;
- le bande di incertezza che affliggono buona parte delle costanti di reazione per gli idrocarburi possono essere sfruttate per ottimizzarle, al fine di includere nelle reazioni sopravvissute gli effetti dei percorsi di reazione non più presenti nel meccanismo ridotto.

La funzione di merito per il meccanismo è stata definita come nell’Equazione (2):

$$f = -\log \left\{ \sum_{j=1}^{n_c} \left[ \sum_{k=1}^{n_s} \int_{\tau=0}^{\tau=t_j} W_k \frac{|X_{j,k}^{full}(\tau) - X_{j,k}^{red}(\tau)|}{X_{j,k}^{red}(\tau)} d\tau + \int_{\tau=0}^{\tau=t_j} \frac{|T_{j,k}^{full}(\tau) - T_{j,k}^{red}(\tau)|}{T_{j,k}^{red}(\tau)} d\tau \right] \right\}. \quad (2)$$

Questa formulazione, sviluppata a partire da una struttura a norma vettoriale, consente di valutare l’accuratezza del meccanismo ridotto sulla base del suo confronto diretto con il meccanismo completo, considerando 1) la presenza di un numero  $n_c$  di casi operativi che definiscono lo spazio di validità desiderato per il meccanismo; 2) il confronto non mediato ma istantaneo sull’evoluzione temporale dei casi scelti; 3) una valutazione specifica delle evoluzioni di ciascuna specie, e non solamente del comportamento termico complessivo del sistema. Inoltre, si è adottata una formulazione logaritmica al fine di rendere questa funzione di errore adatta a metodologie di ottimizzazione basate su algoritmi genetici, che sono particolarmente consigliate per l’ottimizzazione in presenza di un vasto numero di variabili (Mattarelli et al., 2009). La funzione di errore è infatti adoperata come strumento analitico per valutare l’accuratezza non solo di un meccanismo costituito da un determinato sottoinsieme di reazioni e specie, ma di tutti i meccanismi ridotti con la stessa composizione, ma in cui le costanti di reazione posseggano valori differenti.

Come indicato nell’ultimo punto, è dunque risultato possibile impostare una metodologia iterativa volta a generare un meccanismo ridotto ed ottimizzato, che si comporti similmente al meccanismo complessivo, ovvero posseda un valore della funzione di merito superiore ad una soglia definita a priori. Complessivamente, la metodologia risponde allo schema qui di seguito riportato:

1. selezione di un valore di soglia iniziale per la determinazione del sottoinsieme di specie e reazioni;
2. riduzione del meccanismo sulla base di una metodologia di selezione delle specie (es., analisi del flusso di elementi, ‘EF’);
3. valutazione della funzione di merito; se insufficiente, vai al punto 5;
4. abbassamento della soglia per la riduzione del meccanismo; vai al punto 2;
5. ottimizzazione delle costanti di reazione per ripristinare l’accuratezza del meccanismo ridotto;

6. valutazione della funzione di merito; se sufficiente, vai al punto 4;
7. ripristino dell'ultimo meccanismo valido;
8. ulteriore ottimizzazione in confronto con misurazioni sperimentali (tempi di autoaccensione, fiamme laminari premiscelate).

La scelta di effettuare una riduzione progressiva del meccanismo è stata motivata dalla necessità di effettuare *step* di ottimizzazione graduali, dove ovvero la soluzione ottimale fosse sufficientemente vicina alla soluzione iniziale, dal momento che la vastità dello spazio di ricerca (pari a n. 2 coefficienti per ogni reazione presente nel meccanismo) può rendere difficoltosa la soluzione del problema di ottimizzazione.

**2.2 Risultati.** Al fine di mostrare la efficacia della metodologia proposta, sono riassunti in Figura 3 alcuni risultati relativi alla riduzione di un meccanismo di combustione dell'etanolo, a partire da un meccanismo costituito da 58 specie e 383 reazioni, con dimensioni complessive finali di 30 specie e 155 reazioni. In particolare, nella prima figura sono mostrati i profili di temperatura simulati per un reattore adiabatico ad una delle condizioni iniziali scelte per la realizzazione del meccanismo. La figura mostra come il meccanismo ridotto, se semplicemente costituito da un sottoinsieme di specie e reazioni del meccanismo originale, non è in grado di prevedere il tempo di autoaccensione corretto, e mostra anche un comportamento differente, prevedendo lo sviluppo di una *cool flame region* che a in corrispondenza di miscela grassa non è invece osservabile. Lo stesso meccanismo, dopo la fase di ottimizzazione delle costanti di reazione, mostra invece un'ottima corrispondenza in termini di previsioni quale il meccanismo completo. La seconda figura è invece esemplificativa di una seconda fase di ottimizzazione basata su rilievi sperimentali, pubblicati in (Curran et al., 1992). Come si può notare, il meccanismo ulteriormente ottimizzato mostra previsioni dell'anticipo di accensione alle basse temperature iniziali molto più simili a quanto mostrato dalle misurazioni sperimentali riportate in (Curran et al., 1992).

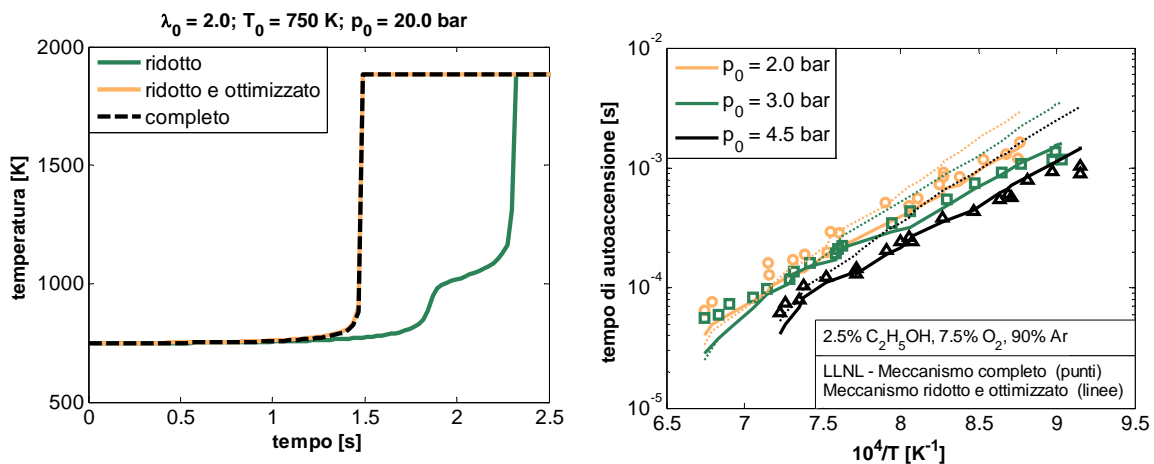


Fig. 3 – A sinistra: previsione dell'andamento di temperatura del reattore in una delle condizioni di validità selezionate per il modello ridotto. Confronto tra il meccanismo completo, il meccanismo ridotto, ed il meccanismo ridotto e con costanti di reazione ottimizzate. A destra: tempi di autoaccensione di una miscela di etanolo ed ossigeno in argon; simulazioni con il meccanismo completo e quello ridotto ed ulteriormente ottimizzato sulla base delle misurazioni sperimentali da (Curran et al., 1992).

Ulteriori e più dettagliate analisi di validazione, riportate in (Perini et al., 2012), mostrano come, quando applicati ad un caso multidimensionale di motore operato in combustione HCCI, il meccanismo completo non è in grado di prevedere l'accensione della miscela, a causa del maggiore tempo di ritardo che lo caratterizza, mentre con il meccanismo ridotto ed ottimizzato le simulazioni mostrano un'ottima corrispondenza sia del tempo di anticipo di autoaccensione, sia del calore totale rilasciato.

### 3. JACOBIANI ANALITICI SPARSI

Come accennato nel paragrafo precedente, la simulazione della cinetica chimica di combustione costituisce, all'interno del *framework* di simulazione multidimensionale del motore, un ambiente sostanzialmente indipendente, che comunica al solutore di Navier-Stokes unicamente i termini sorgenti di specie ed energia interna in ogni cella dovuti alle reazioni chimiche. Dato un meccanismo di combustione arbitrario, rappresentato da un insieme di  $n_s$  specie ed  $n_r$  reazioni:

$$\sum_{i=1}^{n_s} \nu'_{k,i} M_i \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n_s} \nu''_{k,i} M_i, \quad k = 1, \dots, n_r, \quad (3)$$

in ciascuna cella è integrato un sistema di equazioni differenziali ordinarie che rappresentano la conservazione della massa e dell'energia nella cella in presenza di reazioni:

$$\begin{aligned} \frac{dY_i}{dt} &= \frac{W_i}{\rho} \sum_{k=1}^{n_r} (\nu''_{k,i} - \nu'_{k,i}) q_k(\mathbf{Y}, T), \quad i = 1, \dots, n_s; \\ \frac{dT}{dt} &= -\frac{1}{\bar{c}_v(\mathbf{Y}, T)} \sum_{i=1}^{n_s} \left( \frac{U_i(T)}{W_i} \frac{dY_i}{dt} \right); \end{aligned} \quad (4)$$

l'integrazione di questo sistema è solitamente realizzata accoppiando una libreria per il calcolo delle proprietà termodinamiche e dei tassi di reazione in miscele gassose reagenti (ad. esempio, il CHEMKIN), ad un integratore di sistemi di equazioni differenziali ordinarie di tipo *stiff* (ad esempio, VODE, DASSL, RADAU5, LSODES, etc.). Lo studio di una libreria che possa sfruttare una formulazione sparsa del problema della cinetica chimica, ed il suo accoppiamento ai solutori negli stessi termini, ovvero una formulazione sparsa sia dei tassi di reazione che dell'algebra collegata al calcolo della matrice di Jacobi del sistema, è giustificato da alcune motivazioni principali:

- il costo computazionale standard per la valutazione dello Jacobiano è dell'ordine di  $n_s^2$  quando valutato internamente dai solutori, tramite differenze finite, mentre è dell'ordine di  $n_s$  quando valutato analiticamente in forma sparsa;
- lo spazio di memoria richiesto per la valutazione dello Jacobiano segue la stessa scala;
- la decomposizione triangolare dello Jacobiano, necessaria per la risoluzione del sistema caratteristico delle iterazioni di Newton nel solutore, è dell'ordine di  $n_s^3$ , e si riduce ad  $n_s$  in presenza di Jacobiano sparso;
- la sparsità dei meccanismi di reazione è evidente anche nei meccanismi di dimensioni più contenute ( $n_s < 50$ );
- le iterazioni di Newton convergono quadraticamente anziché linearmente in presenza di Jacobiano analitico;

- lo sviluppo analitico dello Jacobiano consente di determinare una formulazione generale per meccanismi di combustione arbitrari, mentre l'adozione di software per la differenziazione automatica richiederebbe la generazione di routine specifiche per ogni meccanismo di combustione considerato.

Lo sviluppo di una espressione analitica dello Jacobiano dipende dalle tipologie di reazioni considerate, e della formulazione impiegata per descrivere le proprietà termodinamiche delle specie; la presentazione dettagliata delle sue relazioni costitutive è oltre lo scopo di questo articolo. Per mostrarne l'efficacia, in Figura 4 sono rappresentate le strutture di sparsità degli Jacobiani associati a tre meccanismi di combustione per l'*n*-eptano, di differenti dimensioni, tipicamente impiegati per simulazioni di combustione Diesel: un meccanismo semplificato, costituito da 29 specie e 52 reazioni (Patel et al., 2004), un meccanismo semi-dettagliato, costituito da 160 specie e 1540 reazioni (Seiser et al., 2000), ed un meccanismo per combustibili con numero di cetano variabile, costituito da 1034 specie e 4236 reazioni (Curran et al., 2002).

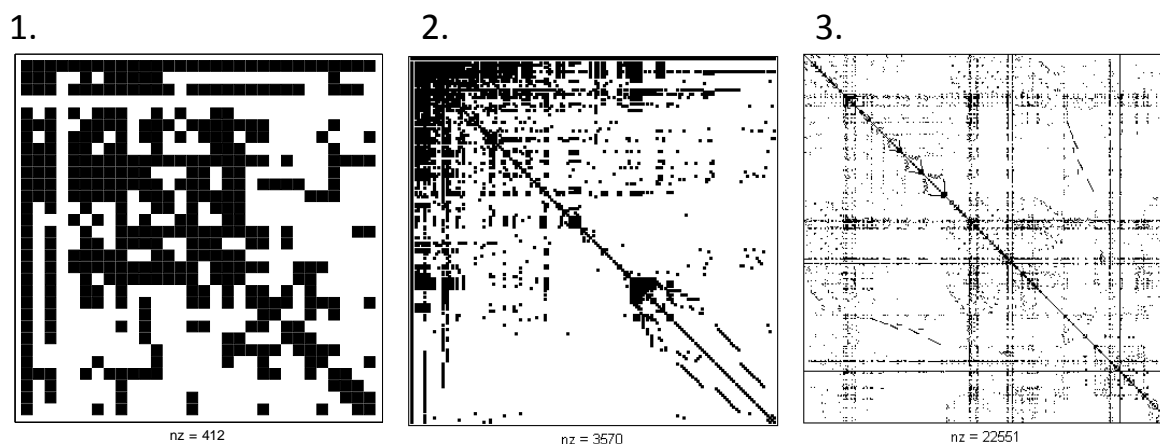


Fig. 4 – Strutture di sparsità di tre meccanismi di combustione dell' *n*-eptano: 1. 29 specie e 52 reazioni, 54%; 2. 160 specie e 1540 reazioni, 86%; 3. 1034 specie e 4236 reazioni, 98%.

Come si può notare, anche nel meccanismo di dimensioni minori, il numero di elementi nulli della matrice Jacobiana è superiore al 50%, e raggiunge circa il 98% nel meccanismo di combustione per combustibili con numero di cetano variabile (PRF, *primary reference fuels*). L'incremento in efficienza computazionale ottenibile mediante lo sfruttamento di questo grado di sparsità è bene rappresentato in Figura 5 dal confronto tra i tempi necessari al calcolo dello Jacobiano quando calcolato con il metodo standard delle differenze finite, e quando valutato analiticamente. Già a partire dal meccanismo di dimensioni più ridotte, l'approccio analitico richiede un tempo di calcolo di circa 5 volte inferiore rispetto alla formulazione alle differenze finite; all'aumentare delle dimensioni del meccanismo, la differenza aumenta fino a raggiungere circa due ordini di grandezza in corrispondenza di un meccanismo costituito da 2878 specie ed 8555 reazioni (Herbinet et al., 2010).

**3.1. Validazione dell'approccio.** Al fine di validare il codice sviluppato secondo questo approccio, è stata predisposta una matrice di simulazioni relative a reattori adiabatici a volume costante. Per simulare condizioni di calcolo il più possibile simili a quanto avviene quando la



cinetica di combustione viene integrata in combinazione con codici CFD di simulazione motore, sono state considerate 18 configurazioni iniziali di un reattore di aria ed n-eptano, che considerano dosature iniziali della miscela  $\lambda_0 \in \{0.5, 1.0, 2.0\}$ ; pressioni iniziali  $p_0 \in \{2.0, 20.0\}$  bar; temperature iniziali  $\lambda_0 \in \{750, 1000, 1500\}$  K. Ciascuna delle simulazioni è stata integrata per un intervallo di tempo pari a circa 1.5 volte il rispettivo tempo di autoaccensione della miscela, e l'intervallo complessivo è stato suddiviso in 100 sotto-intervalli di integrazione, per simulare le condizioni di avanzamento temporale dei codici CFD, dove è il solutore del campo di moto a determinare il passo, che solitamente non eccede valori intorno a  $10^{-7} - 10^{-6}$  secondi.

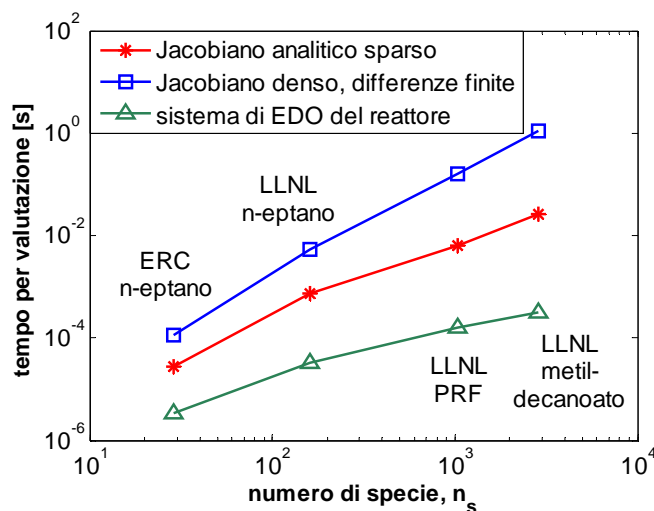


Fig. 5 – Confronto tra i tempi di CPU richiesti per la valutazione del sistema di EDO relativo alla cinetica chimica in un reattore con differenti meccanismi di combustione, e della sua matrice Jacobiana associata, calcolata con il metodo delle differenze finite od in modo analitico.

Come mostrato per in Figura 6 per uno dei casi considerati, le simulazioni sono state confrontate con il codice CHEMKIN-II, tradizionale riferimento nell'ambito della combustione, nonché ancora uno dei pacchetti più di frequente adottati per l'accoppiamento con codici CFD multidimensionali. Innanzitutto è stato possibile verificare una eccellente corrispondenza dei risultati, simulati in termini di frazioni molari delle specie, anche in corrispondenza di valori assoluti per le specie che possono variare di numerosi ordini di grandezza. Allo stesso tempo, si è verificata una significativa riduzione dei tempi complessivi di calcolo, già superiore a circa 2 volte per il meccanismo di combustione più piccolo, e che ha raggiunto circa due ordini di grandezza in corrispondenza del meccanismo costituito da circa 1000 specie.

Le prestazioni confortanti, e la significativa riduzione dei tempi di calcolo mostrati dal codice sono stati confermati anche per la simulazione di motori a combustione interna. In particolare, si è modellato come caso di riferimento un motore Caterpillar SCOTE (*Single Cylinder Oil Test Engine*), operato in modalità di combustione a due stadi, per il quale le misurazioni sperimentali sono state effettuate da Hardy presso l'Engine Research Center dell'Università del Wisconsin-Madison (Hardy, 2005). Il codice per la cinetica chimica è stato accoppiato ad una versione personalizzata del codice KIVA-4 (Torres e Trujillo, 2006), relativamente alla quale maggiori dettagli sono riportati in (Perini et al., 2012a). Sono state previste due griglie di calcolo: una più lasca, costituita da 16950 celle al punto morto inferiore, ed una più raffinata, con una risoluzione di circa 1 mm, costituita da 42480 celle al punto morto inferiore. Per ra-

gioni di sintesi, in Figura 7 è riportato il confronto tra il codice sviluppato ed il CHEMKIN-II per la sola griglia più lasca, e per il meccanismo di combustione più ridotto (Patel et al., 2004); le curve di pressione media interno-cilindro ottenute con i diversi programmi per la cinetica chimica appaiono indistinguibili, e buona è anche la concordanza con il rilievo sperimentale, nonostante numerose fonti in letteratura riportino criticità per i modelli standard di evoluzione dello spray in KIVA-4. Simili confronti sono stati eseguiti anche con la griglia più raffinata, e con il meccanismo di combustione (Seiser et al., 2000) costituito da 160 specie. In Figura 8, sono invece mostrati gli istogrammi relativi ai tempi di calcolo richiesti dalle simulazioni.

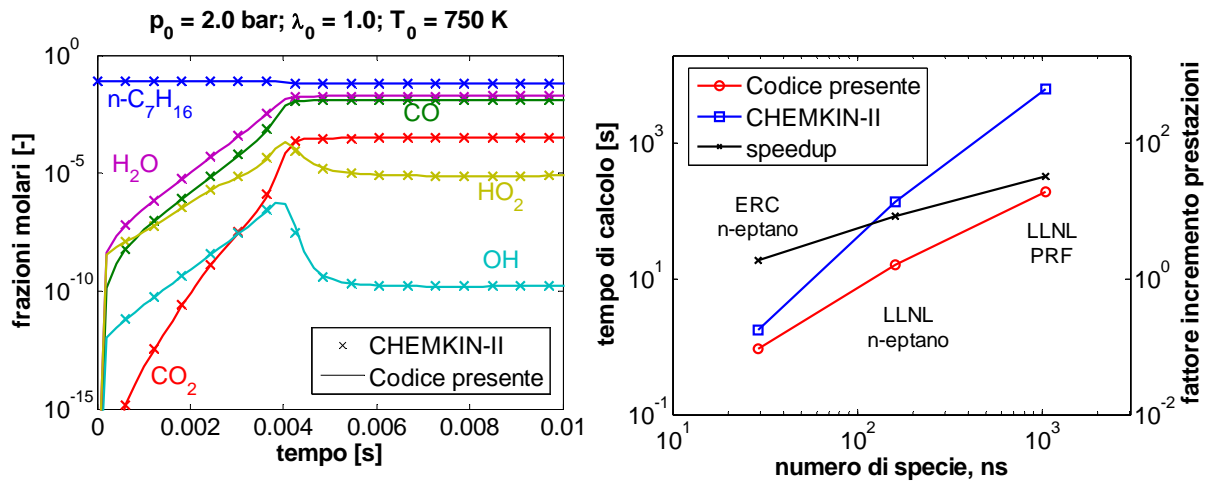


Fig. 6 – Confronto tra il codice sviluppato (integratore LSODES) e CHEMKIN-II (integratore VODE): (sinistra) validazione in uno dei 18 casi considerati; (destra) tempi di calcolo complessivi per la integrazione dei 18 casi nei tre meccanismi di combustione considerati.

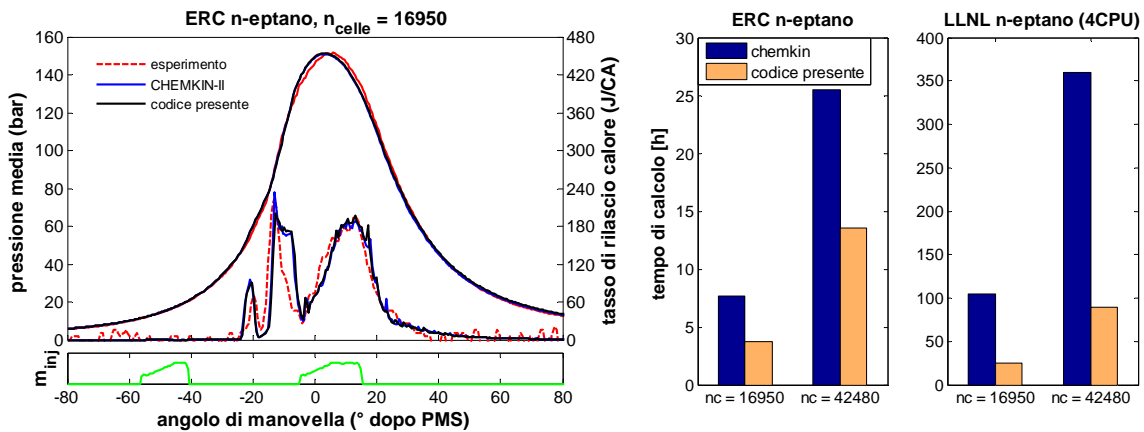


Fig. 7 – Confronto tra il codice sviluppato e CHEMKIN-II quando accoppiati a KIVA-4 per la simulazione del motore Caterpillar SCOTE, operato in “two-stage combustion mode”. (sinistra) Pressione media interno-cilindro e tasso di rilascio calore. (destra) Tempi di calcolo necessari per la simulazione del caso motore considerato, con le due differenti griglie di calcolo, due meccanismi di combustione, e due codici per la cinetica chimica.

È possibile notare come la riduzione dei tempi di calcolo consentita dall'adozione del codice sviluppato per la cinetica chimica sia leggermente inferiore a quanto osservato per la simulazione di singoli reattori adiabatici; ciò avviene a causa del fatto che vi è una aliquota non trascurabile del tempo di calcolo dedicata alla soluzione del campo di moto. La riduzione è comunque molto significativa sia in presenza del meccanismo più ridotto, dove una simulazione con la griglia standard è completata in meno di 4 ore; ed anche in presenza del meccanismo dettagliato, dove il tempo di calcolo richiesto dalla simulazione con la griglia standard, su 4 processori, impiega poco meno di 25 ore. Complessivamente, la riduzione del tempo di calcolo per il meccanismo maggiore è stata in media superiore al 75%.

## **CONCLUSIONI**

Gli approcci alla simulazione dei motori a combustione interna con meccanismi di cinetica chimica semi-dettagliati hanno mostrato come sia possibile effettuare simulazioni accurate per lo studio della combustione in tempi di calcolo ragionevoli anche da un punto di vista industriale. In primo luogo, lo sviluppo di un codice di calcolo in cui l'impiego di una architettura numerica che calzasse la struttura del problema ha consentito di ridurre notevolmente i tempi di calcolo rispetto ad un approccio comunemente impiegato, che prevede la semplice interazione di codici sviluppati per una ampia gamma di possibilità. In secondo luogo, la metodologia messa a punto per la realizzazione di modelli di combustione ridotti ha mostrato come un approccio utile dal punto di vista ingegneristico sia quello che consenta di ottenere informazioni significative a partire da un modello il più semplice possibile, che tuttavia sia in grado di rispettare i vincoli di validità determinati dalla tipologia di problema studiato.

In conclusione, facendo riferimento allo schema di Figura 1, vi sono ancora numerosi possibili sviluppi. Essi si possono concentrare in particolare sulle prestazioni dell'integratore di equazioni differenziali, che può essere studiato in modo specifico per la cinetica chimica, tenendo in considerazione le molteplici scale temporali possedute dalle specie. Inoltre, ulteriori sviluppi possono coinvolgere la soluzione a livello della griglia di calcolo, dove sarebbe possibile ridurre il numero complessivo di integrazioni ad un sottoinsieme di celle, reattivamente simili, da identificarsi mediante algoritmi di raggruppamento.

## **RINGRAZIAMENTI**

Gli autori desiderano ringraziare la VM Motori di Cento (FE), per aver contribuito al presente lavoro mediante il finanziamento di un assegno di ricerca. Si ringrazia sentitamente il prof. Rolf D. Reitz dell'Università del Wisconsin-Madison, per aver ospitato il dott. Perini per un periodo di studio presso l'Engine Research Center, ed il prof. Emanuele Galligani per le proficue discussioni sull'integrazione di sistemi di EDO.

## **Bibliografia**

Curran H.J., Dunphy M.P., Simmie J.M., Westbrook C.K., Pitz W.J. (1992), "Shock tube ignition of ethanol, isobutene and MTBE: Experiments and modeling", Symposium (International) on Combustion 24, p. 769.

Curran H.J., Gaffuri P., Pitz W.J., Westbrook C.K. (2002), "A Comprehensive Modeling Study of iso-Octane Oxidation", Combustion and Flame 129, p. 253.

Hardy W.L. (2005), "An Experimental Investigation of Advanced Diesel Combustion Strategies for Emissions Reductions in a Heavy-Duty Diesel Engine at High Speed and Medium Load", M. Sc. Thesis, University of Wisconsin-Madison.

He K., Androulakis I.P., Ierapetritou M.G. (2010), "On-the-fly reduction of kinetic mechanisms using element flux analysis", *Chemical Engineering Science* 65, pag. 1173.

Herbinet O., Pitz W.J., Westbrook C.K. (2010), "Detailed chemical kinetic mechanism for the oxidation of biodiesel fuels blend surrogate", *Combustion and Flame* 157, p. 893.

Kokjohn S.L., Hanson R.M., Splitter D.A., Reitz R.D. (2011), "Fuel reactivity controlled compression ignition (RCCI): a pathway to controlled high-efficiency clean combustion", *International Journal of Engine Research* 12, p. 209.

Lu T., Law C.K. (2005), "A directedrelationgraph method for mechanism reduction", *Proceedings of the Combustion Institute* 30, pag. 1333.

Lu T., Law C.K. (2009), "Toward accommodating realistic fuel chemistry in large-scale computations", *Progress in Energy and Combustion Science* 35, p. 192.

Mattarelli E., Perini F., Rinaldini C.A. (2009), "Optimization of a Supercharged Single Cylinder Engine for a Formula SAE Racing Car", *SAE International Journal of Engines* 2, pag. 199.

Perini F. (2011), "Optimally reduced reaction mechanisms for Internal Combustion Engines running on biofuels", *Tesi di Dottorato, Università di Modena e Reggio Emilia*.

Perini F., Brakora J.L., Cantore G., Reitz R.D. (2012) "Development of reduced and optimized reaction mechanisms based on genetic algorithms and element flux analysis", *Combustion and Flame* 159, p. 103.

Perini F., Cantore G., Galligani E., Reitz R.D. (2012a), "Validation of a sparse analytical Jacobian chemistry solver for heavy-duty Diesel engine simulations with comprehensive reaction mechanisms", *SAE Commercial Vehicles Congress, Chicago (USA), 2-3 ottobre 2012, abstract accettato per la pubblicazione*.

Seiser R., Pitsch H., Seshadri K., Pitz W., Curran H. (2000) "Extinction and autoignition of n-heptane in counterflow configuration", *Proceedings of the Combustion Institute* 28, p. 2029.

Torres D.J., Trujillo M.F. (2006), "KIVA-4: An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays", *Journal of Computational Physics* 219, p. 943.