

# **Modellazione della caratterizzazione di numero di ottani e distillazione di benzine moderne ed ottimizzazione dei loro surrogati per la simulazione CFD di motori operanti con combustioni a bassa temperatura**

## PROGETTO DI RICERCA E PIANO DI ATTIVITA'

### PROGETTO DI RICERCA

La ricerca di surrogati in grado di rappresentare correttamente le proprietà fisiche e chimiche delle benzine per applicazioni motore è un argomento da tempo fortemente discusso ma ancora aperto, specialmente a seguito di nuovi scenari motoristici che prospettano l'utilizzo di bio-combustibili e combustibili sintetici, e di strategie di combustione a bassa temperatura, HCCL, GCI, SACI. L'utilizzo combinato di questi combustibili e modalità di combustione ha dimostrato il potenziale per ridurre drasticamente sia le emissioni inquinanti, in particolare polveri sottili e NOx, sia i consumi di combustibile a seguito delle maggiori efficienze termica ed adiabatica raggiunte dal motore. Per massimizzare la resa di queste soluzioni, è stata dimostrata la necessità di utilizzare tecniche di iniezione per generare una stratificazione ad hoc della miscela, la quale induce anche una stratificazione termica dovuta alla liberazione del calore latente di vaporizzazione del combustibile iniettato. Dunque, operando modalità di combustione a bassa temperatura (HCCL, GCI, SACI) è fondamentale ottenere una distribuzione spaziale di temperatura e composizione accuratamente targetizzata. A tale fine, lo sviluppo di una metodologia per realizzare il design ed il test in simulazioni CFD del comportamento evaporativo delle benzine in queste condizioni, costituisce un catalizzatore efficace per ottimizzare e rendere operative su ampi intervalli di carico queste nuove soluzioni. Per raggiungere questo obiettivo, è necessaria la formulazione di surrogati adatti a rappresentare dettagliatamente il comportamento evaporativo della benzina, sia medio (di cui sono responsabili le frazioni sature ed ossigenate e.g. bio-combustibili), sia quello ritardato (di cui sono maggiormente responsabili le frazioni aromatiche) che si dimostra essere fortemente correlato alla produzione di polveri sottili. Nell'attuale letteratura, la ricerca sulla formulazione di surrogati è stata fortemente incentrata sulle caratteristiche chimiche dei combustibili o su entrambe quelle chimiche e fisiche con tecniche piuttosto classiche (regressioni, algoritmi genetici). Tuttavia, i risultati presentati per la rappresentazione dell'evaporazione non sono coerenti col livello di dettaglio necessario negli scenari correnti e futuri. Lo scopo della presente attività è quello di sviluppare una metodologia basata su modelli zero-dimensionalmente dettagliati per la caratterizzazione della volatilità (banco virtuale di distillazione) e del numero di ottani (banco virtuale motore CFR) di nuovi combustibili. I modelli di caratterizzazione virtuale vengono poi interrogati da una metodologia che accoppia l'utilizzo di strumenti statistici avanzati di tipo Bayesian con tecniche di regressione classiche per l'esplorazione dello spazio delle soluzioni dei migliori surrogati rappresentativi del comportamento evaporativo delle nuove benzine. Le composizioni ottimizzate, verranno poi testate in simulazioni motore 3-D CFD progettando matrici di calcolo col fine di studiare la sensibilità dei surrogati generati, alle strategie di stratificazione della carica.

### PIANO DI ATTIVITA'

L'attività precedentemente inquadrata sarà svolta secondo i passi elencati di seguito:

- 1) Raccolta delle caratteristiche geometriche ed operative dei banchi sperimentali secondo le normative di riferimento: ASTM-D86, distillazione; ASTM-D2699 e ASTM-D2700, caratterizzazione numero di ottani.
- 2) Modellazione zero-dimensionale ex-novo in ambiente Python del banco di distillazione. Validazione con dati sperimentali dalla letteratura di curve di distillazione di miscele con composizione nota.

- 3) Modellazione zero-dimensionale ex-novo in ambiente Python ed accoppiamento con solutore di cinetica chimica (Cantera) del banco di caratterizzazione del numero di ottani. Validazione con dati sperimentali dalla letteratura di RON e MON di miscele con composizione nota.
- 4) Determinazione della palette da utilizzare per la generazione di surrogati in grado di catturare il comportamento evaporativo delle benzine. Il numero ed il tipo di componenti puri vengono determinati a partire da studio della letteratura e Analisi di Gas Cromatografia.
- 5) Implementazione di un algoritmo avanzato di ottimizzazione secondo un processo Bayesiano per l'esplorazione e la riduzione dello spazio delle soluzioni (frazioni in volume di ogni elemento della palette) e successiva eventuale applicazione di tecniche di regressione standard. Validazione con dati sperimentali di benzine moderne caratterizzate disponibili in letteratura.
- 6) Analisi di sensibilità dell'algoritmo al numero di pesi, numero di componenti della palette ed alla classe chimica specifica di alcuni elementi.
- 7) Realizzazione di matrici di simulazioni di strategie di iniezione realistiche per applicazione motori HCCI e SACI in regime di carica stratificata: SOI, EOI, numero di eventi di iniezione, suddivisione della massa di benzine degli eventi di iniezione.
- 8) Simulazione 3-D CFD della matrice di strategie di iniezione in geometria motore e test di diversi surrogati della stessa benzina.
- 9) Analisi comparativa dei risultati 2-D e dei campi 3-D di temperatura e titolo e valutazione del migliore accoppiamento tra campi generati dal surrogato fisico ed il successivo surrogato chimico incaricato di simulare i processi di auto-accensione non detonante tipici dei motori a combustione a bassa temperatura.

#### Activity plan: brief view

In order to enhance the advantages (low NO<sub>x</sub>, low soot, fuel economy) achievable with Low Temperature Combustion modes such as GCI, HCCI and SACI in next generation engines, the study of tailored injection strategies and fuel spatial stratification inside the combustion chamber is mandatory. To this aim, the design of the proper surrogate capable to mimic the evaporative behaviour of the real gasoline play a key role. This activity deals with the implementation of a machine-learning based methodology to optimize the surrogate composition in order to achieve accurate reproductions of the fuel evaporation and the following equivalence ratio and temperature in-cylinder stratification. Since the accurate capture of those features relies on the match of a large number of targets, the application of common algorithms would be awful, thus, a new advanced Bayesian methodology will be implemented. Furthermore, two dedicated sub-models will be implemented to estimate the volatility (distillation curve) and the octane rating (RON, MON) of the mixture attempts.