

CORRELAZIONE PER LA STIMA DEI TEMPI DI IGNIZIONE

per composti che presentano accensione a due stadi



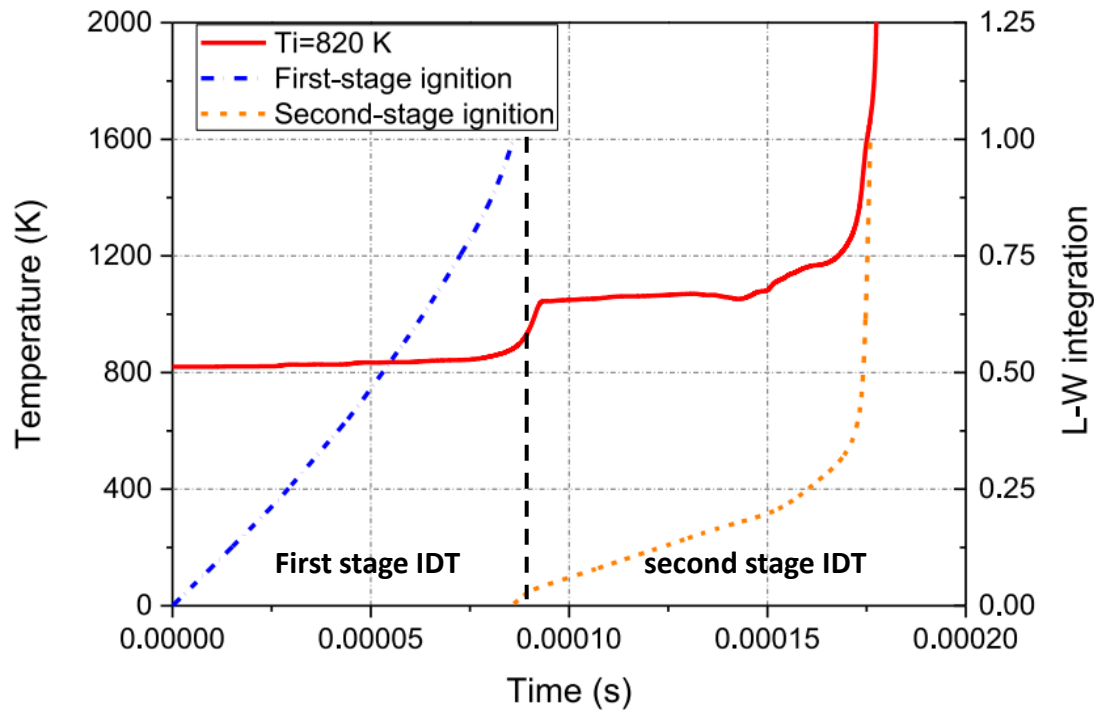
Somma Andrea

Principi di combustione

Politecnico di Milano - 2022



Cos'è un meccanismo di accensione a due stadi e perché avviene?

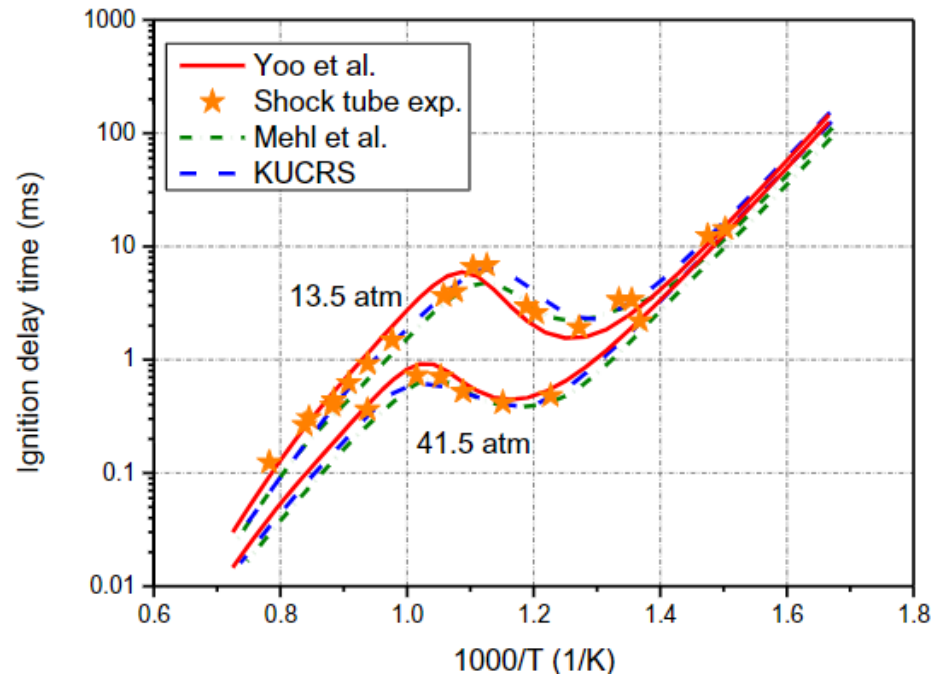


Rappresentazione dell'andamento della temperatura in funzione del tempo e stima dell'integrale di Livengood-Wu per i due stage di ignizione.

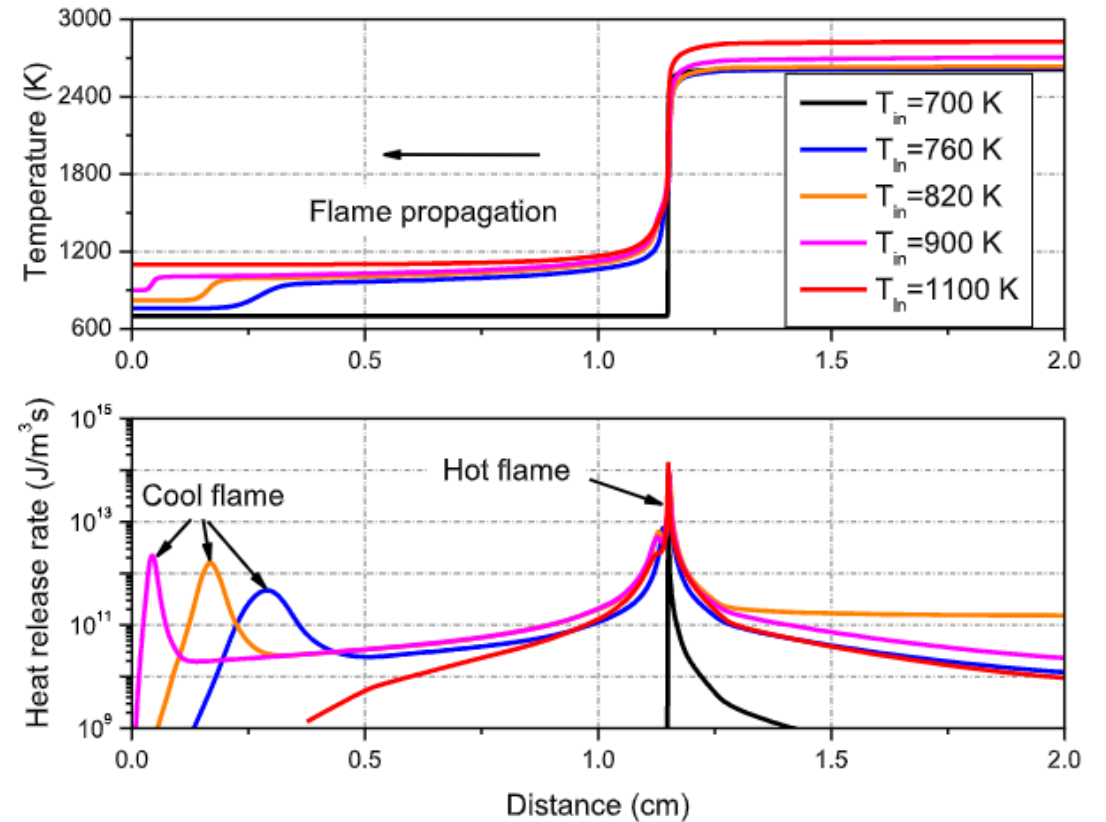
Tale fenomeno è dovuto principalmente all'attivazione di diversi cammini di reazione in funzione della temperatura iniziale del sistema:

- **Bassa temperatura (LT):** caratterizzato da reazioni a energia di attivazione praticamente nulla, con consistente formazione di radicali attraverso intermedi perossidici (branching di bassa temperatura).
- **Alta temperatura (HT):** caratterizzato da reazioni con energia di attivazione elevata, soprattutto di beta eliminazione dell'idrogeno (branching di alta temperatura).
- **Media temperatura:** caratterizzato da reazioni ad energia di attivazione media ~ 19 kcal/mol e con numero di radicali costante (no branching), con formazione di eteri ciclici e composti con bassa reattività.

A quali conseguenze porta la presenza di questi 3 meccanismi?



Rappresentazione dell'andamento dei tempi di ignizione al variare di temperatura e pressione, considerando sia dati sperimentali che modelli.



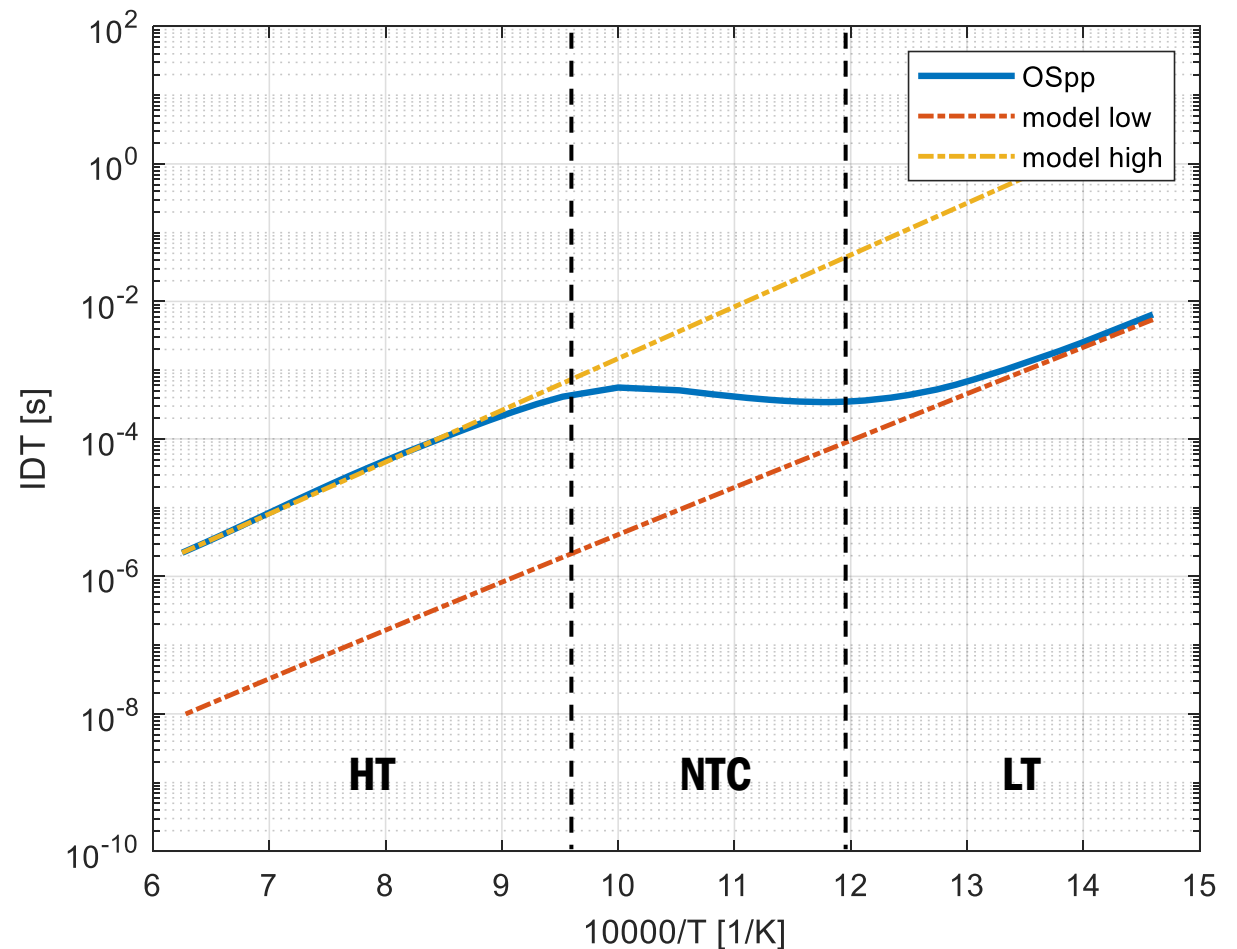
Rappresentazione dell'andamento di temperatura e rilascio del calore per una miscela stechiometrica di aria e n-eptano a 40 bar, al variare della temperatura iniziale.

Come si può sfruttare l'andamento degli IDT per la creazione di una correlazione adatta a stimarli?

- **Trattazione per asintoti:**

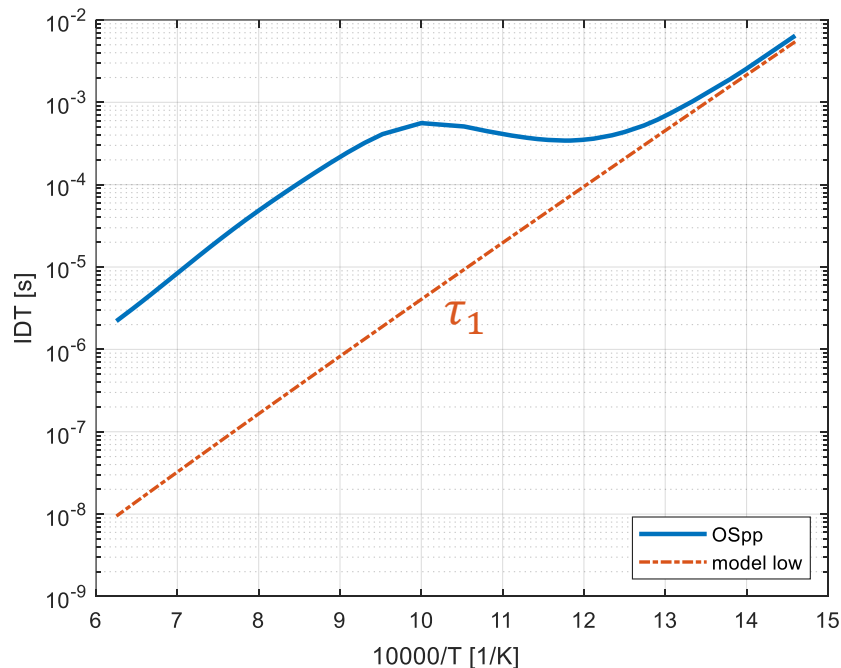
Dato l'andamento a sigmoide della curva in una rappresentazione logaritmica, è possibile distinguere degli andamenti asintotici man mano che si procede verso temperature basse o elevate e un andamento mediato nella regione di NTC (negative temperature coefficient), mantenendo pressione e rapporto di equivalenza carburante-aria costante.

Ad **alte temperature** l'andamento di **second-stage ignition** sarà sempre più presente, a **basse temperature** invece quello di **first-stage ignition**.



Rappresentazione dell'andamento degli IDT al variare della temperatura con n-dodecano in aria stechiometrica a 28 bar, calcolato con OpenSmoke, C1-C16 HT+LT mechanism (Version 2003, March 2020) CRECK.

Qual è la relazione usata per la stima del «first-stage ignition delay time» τ_1 ?



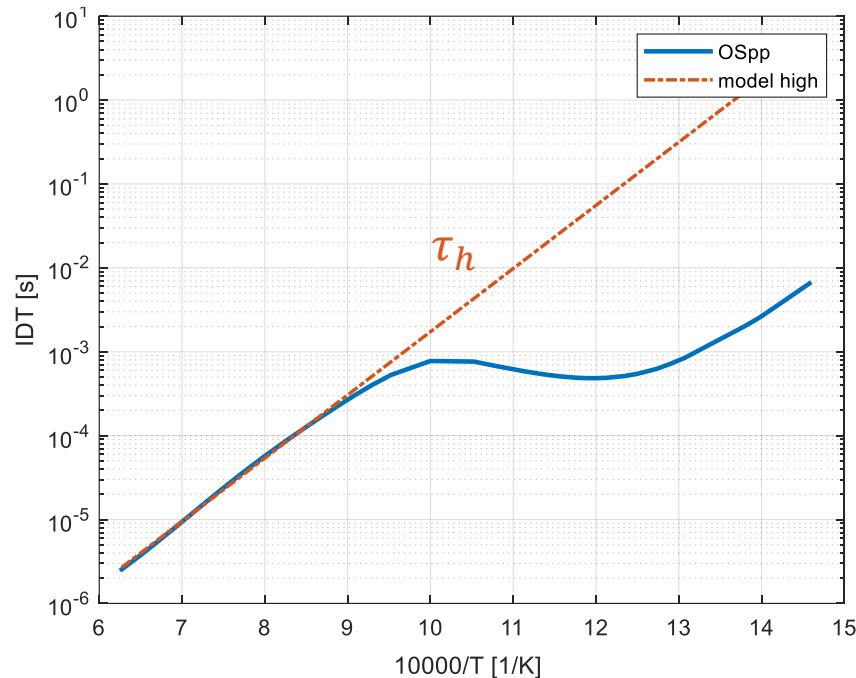
Rappresentazione dell'andamento dei valori di IDT calcolati con OSpp e con il modello illustrato per il first stage IDT, per *n*-dodecano in aria stechiometrica a 28 bar, fitting dei coefficienti da C1-C16 HT+LT mechanism (Version 2003, March 2020) CRECK.

$$\tau_1 = A_1 \cdot P^{n_1} \cdot T^{m_1} \phi^{\beta_1} \cdot \exp\left(\frac{B_1}{T}\right)$$

- A_1 : coefficiente moltiplicativo.
- P^{n_1} : pressione elevata per un coefficiente n_1 , solitamente negativo.
- T^{m_1} : temperatura elevata per un coefficiente m_1 , solitamente negativo.
- ϕ^{β_1} : rapporto di equivalenza elevato per un coefficiente β_1 compreso solitamente tra -1 e 1.
- B_1 : coefficiente interno all'esponenziale solitamente compreso tra 10000 e 14000 [K].

Qual è la relazione usata per la stima del «second-stage ignition delay time» τ_h ?

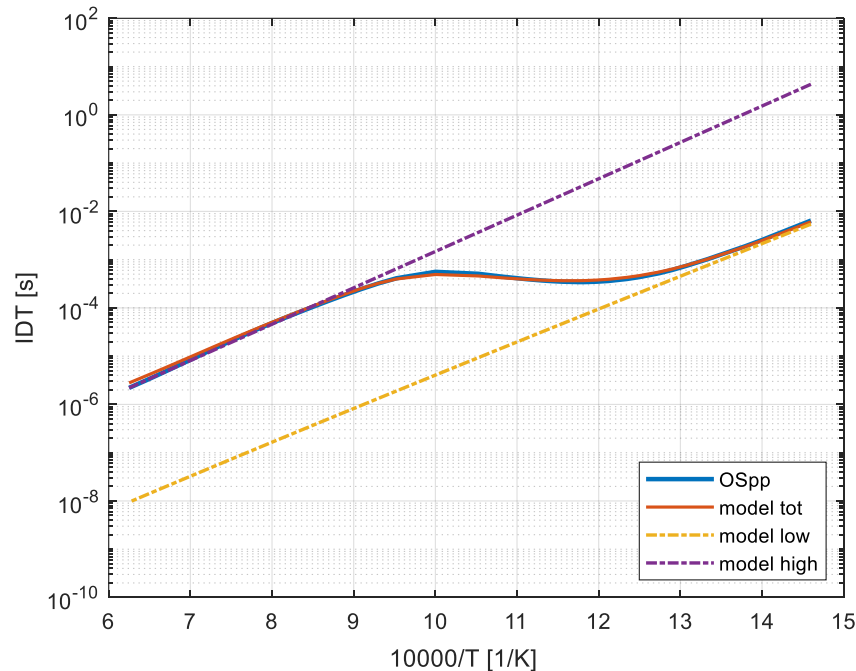
$$\tau_h = A_h \cdot P^{n_h} \cdot \phi^{\beta_h} \cdot \exp\left(\frac{B_h}{T}\right)$$



Rappresentazione dell'andamento dei valori di IDT calcolati con Ospp e con il modello illustrato per il second stage IDT, per n-dodecano in aria stechiometrica a 28 bar, fitting dei coefficienti da C1-C16 HT+LT mechanism (Version 2003, March 2020) CRECK.

- A_h : coefficiente moltiplicativo.
- P^{n_h} : pressione elevata per un coefficiente n_h , solitamente negativo o pari a zero.
- ϕ^{β_h} : rapporto di equivalenza elevato per un coefficiente β_h compreso solitamente tra -1 e 1.
- B_h : coefficiente interno all'esponenziale solitamente compreso tra 14000 e 20000 [K].

Qual è la relazione usata per mediare gli andamenti asintotici nella regione NTC?



Rappresentazione dell'andamento dei valori di IDT calcolati con Ospp e con il modello illustrato per l'intero range di temperature, per n-dodecano in aria stechiometrica a 28 bar, fitting dei coefficienti da C1-C16 HT+LT mechanism (Version 2003, March 2020) CRECK.

$$\tau(T, P, \phi) = \tau_1(T, P, \phi) + \tau_h(T_{CF}, P_{CF}) \left(1 - \frac{\tau_1(T, P, \phi)}{\tau_h(T, P, \phi)} \right)$$

$$T_{CF} = T + \frac{1}{2} \left(\Delta T_{CF} + \sqrt{c_0 + \Delta T_{CF}^2} \right)$$

Stima della temperatura di cold-flame, in funzione di: temperatura iniziale (T), differenza tra T e temperatura di fiamma fredda (ΔT_{CF}), parametro c_0 .

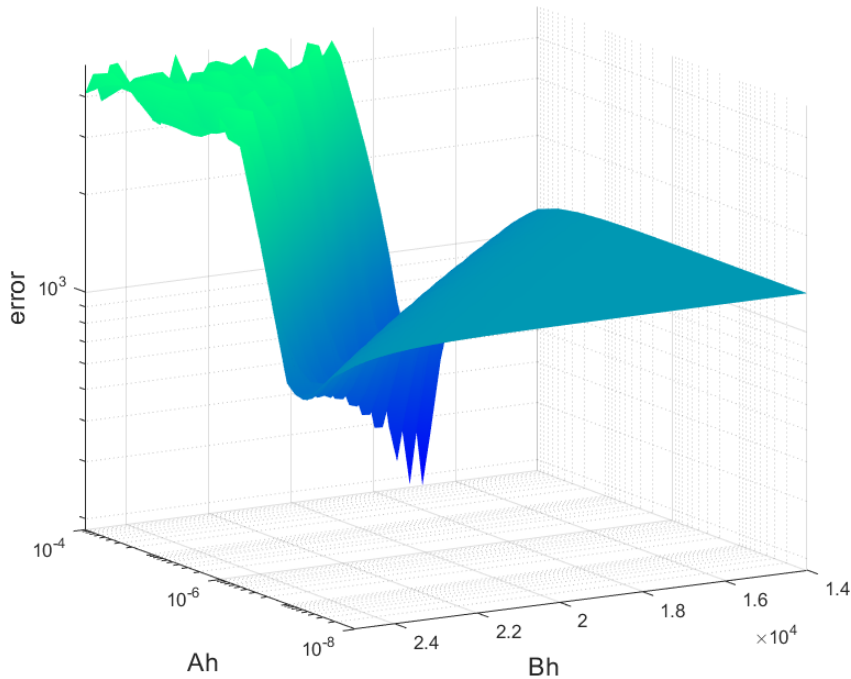
$$\Delta T_{CF} = \omega \cdot \left(T - T_{eq} \cdot P^k \cdot \phi^{\mu} \cdot \left(\frac{100}{99 + \phi} \right)^{\sigma} \right)$$

Stima del ΔT_{CF} in funzione della pressione iniziale, rapporto di equivalenza, temperatura, parametri omega, T_{eq} , k, mu, sigma.

$$\frac{\Delta T_{CF}}{T} = \frac{\Delta P_{CF}}{P} \text{ con ipotesi gas ideale}$$

Stima della temperatura del delta di pressione di cold-flame, sfruttando una trasformazione isovolumica per un gas perfetto.

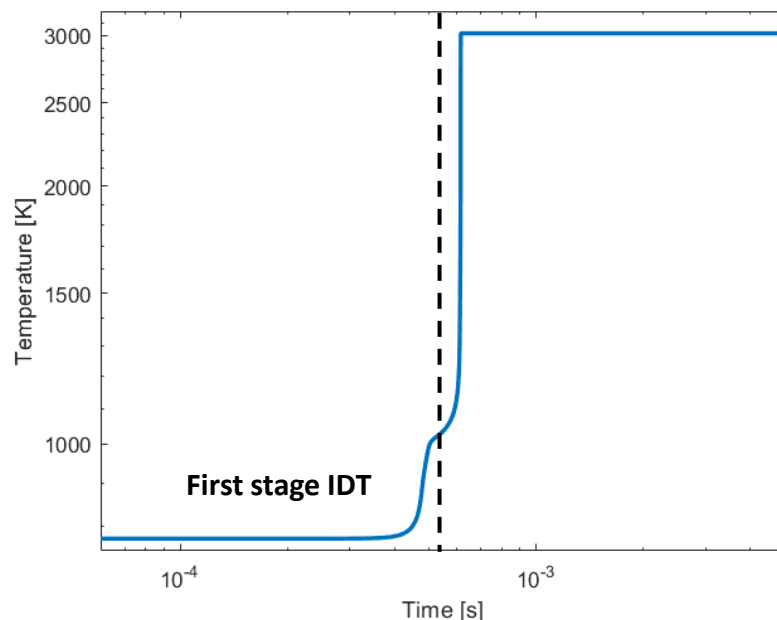
Come sono stati stimati i 15 parametri proposti?



Rappresentazione dell'andamento dell'errore al variare dei parametri A_h e B_h , mantenendo costanti i restanti parametri, per la stima della correlazione τ_h .

- **Range operativi:** scelta dei range di indagine T, P, Φ (ad esempio [700-1600 K, 10-40 bar, 0.75-1.1]), formando così una sorta di griglia tridimensionale.
- **Simulazioni:** raccolta dei degli IDT per tutte le combinazioni della griglia, 5000 punti sono solitamente sufficienti.
- **Stima dei parametri di τ_h :** i 4 parametri illustrati vengono stimati in un range a T elevata (1100-1600K), tramite la minimizzazione dello scostamento tra la curva del modello e dei risultati degli IDT di Ospp, con un algoritmo genetico.
- **Stima dei parametri di τ_1 :** i 5 parametri illustrati vengono stimati in un range a bassa T (700-950K), tramite la minimizzazione dello scostamento tra la curva del modello e dei risultati dei first-stage IDT di Ospp, tramite un algoritmo genetico.
- **Stima dei parametri di τ :** i 6 parametri illustrati vengono stimati lungo tutta la griglia, tramite la minimizzazione dello scostamento tra la curva del modello e dei risultati degli IDT di Ospp, tramite un algoritmo genetico.

Come sono stati estrapolati i first-stage IDT?



Rappresentazione dell'andamento della temperatura al variare del tempo, per una miscela aria-ndodecano stechiometrica (775K, 28 bar), C1-C16 HT+LT mechanism (Version 2003, March 2020) CRECK.

I first-stage IDT sono stati stimati sfruttando il flesso della temperatura dovuto alla diminuzione di reattività del sistema. L' algoritmo di ricerca segue gli step sottostanti:

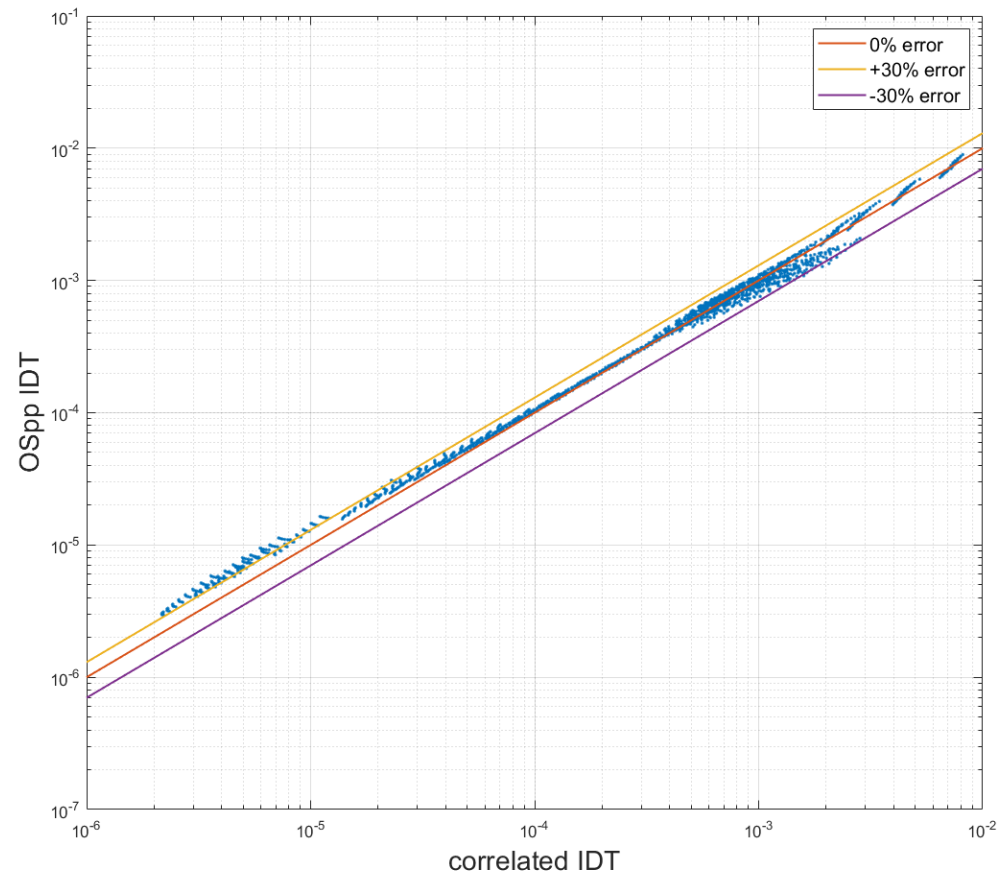
- **Scelta punto:** scelta del punto di indagine compreso nel range di bassa T ad una determinata P e Φ .
- **Calcolo della derivata:** calcolo della derivata della temperatura in funzione del tempo per il punto di indagine scelto.
- **Stima del punto di flesso:** la ricerca del punto di flesso è stata impostata in modo che esso corrisponda al quarto valore consecutivo con derivata decrescente.



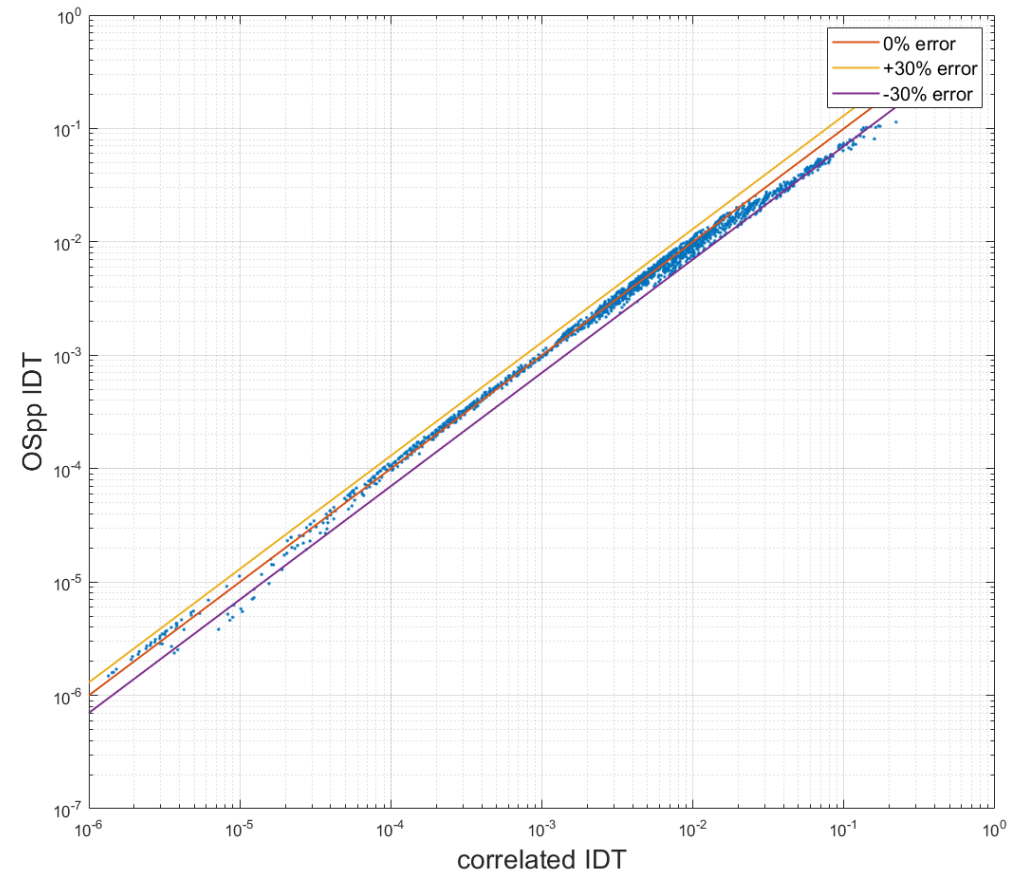
Rappresentazione esemplificativa dell'andamento della derivata della temperatura in funzione del tempo e identificazione del punto di flesso.

- **Iterazione degli step precedenti:** gli step precedenti vengono ripetuti in modo da completare l'analisi lungo tutto il range di P, Φ e bassa T.

L' algoritmo funziona? |



Scostamento dei valori ottenuti con la correlazione illustrata rispetto ai valori di $Ospp$ per una miscela aria-ndodecano, C1-C16 HT+LT mechanism (Version 2003, March 2020) CRECK, T range [600-1600K], P range [20-70 atm], Φ range [0.75-1.1]



Scostamento dei valori ottenuti con la correlazione illustrata rispetto ai valori di $Ospp$ per una miscela aria-isotano, C1-C16 HT+LT mechanism (Version 2003, March 2020) CRECK, T range [685-1600K], P range [14-28 atm], Φ range [0.75-1.1]

Parametri ottenuti per le miscele dodecano/isottano in aria

	A_1	n_1	B_1	β_1	m_1
IC8	1.188e-6	-0.457	14532	-0.3830	-0.7855
NC12	5.203e-6	-0.468	14713	-0.0330	-1.154

	A_h	n_h	B_h	β_h
IC8	6.373e-5	-0.951	17302	-0.639
NC12	8.407e-5	-0.974	17349	-0.102

	T_{eq}	ω	k	c_0	μ	σ
IC8	639.56	-1.055	0.02373	4551.41	0.0734	-0.5884
NC12	933.59	-1.101	0.00783	3481.88	0.0838	-0.2298

REFERENZE |

- *Cuoci, A., Frassoldati, A., Faravelli, T. & Ranzi, E. OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms. Comput. Phys. Commun. 192, 237–264 (2015)*
- *Fethi Khaled, Jihad Badra, Aamir Farooq, Ignition delay time correlation of fuel blends based on Livengood-Wu description, Fuel, Volume 209, 2017, Pages 776-786, ISSN 0016-2361, <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.07.095>*
- *Jiaying Pan, Haiqiao Wei, Gequn Shu, Zheng Chen, Peng Zhao, The role of low temperature chemistry in combustion mode development under elevated pressures, Combustion and Flame, Volume 174, 2016, Pages 179-193, ISSN 0010-2180, <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2016.09.012>*
- *MATLAB version 9.10.0.1613233 (R2021a). (2021).*

**SI RINGRAZIA PER
L'ATTENZIONE**

