

Alma Mater Studiorum – Università di Bologna

DOTTORATO DI RICERCA IN

MECCANICA E SCIENZE AVANZATE DELL'INGEGNERIA

Progetto in ingegneria delle macchine e dei sistemi energetici

Ciclo XXIII

Settore scientifico-disciplinare di afferenza: ING-IND/08

**ANALISI NUMERICA DELLA COMBUSTIONE
DI GAS A BASSO POTERE CALORIFICO
PER APPLICAZIONI A MICROTURBINE A GAS**

Presentata da: Ing. Marco Fussi

Coordinatore Dottorato

**Chiar.mo Prof. Ing.
Vincenzo Parenti Castelli**

Relatore

**Chiar.mo Prof. Ing.
Michele Bianchi**

Esame finale anno 2011

Indice

Introduzione

Obiettivi dello studio

Sommario

1 La combustione di gas a basso potere calorifico all'interno di MTG

1.1 Produzione, caratteristiche ed applicazioni dei "low-BTU gas" analizzati

1.1.1 – Gas derivanti dalla pirolisi di biomasse – Il "Singas"

1.1.2 – L'impianto di pirolisi per la produzione del Singas

1.2 Caratteristiche delle MTG per applicazioni cogenerative

2 Approccio teorico alla fluidodinamica

2.1 Strumenti matematici e principali equazioni utilizzate

2.1.1 – Equazione generica di trasporto

2.1.2 – Equazione di conservazione della massa

2.1.3 – Equazione di bilancio dei momenti

2.1.4 – Equazioni del moto di Navier-Stokes per fluidi newtoniani

2.1.5 – Il tensore degli sforzi

2.1.6 – Equazione dell'energia

2.1.7 – Equazioni mediate secondo Favre

2.2 Teoria della turbolenza

2.2.1 – Introduzione

2.2.2 – La turbolenza

2.2.3 – L'energia cinetica e la sua dissipazione

2.2.4 – Turbolenza omogenea ed isotropa – La cascata dell'energia

2.2.5 – Distribuzione spettrale della turbolenza

3 Tecniche CFD di modellazione della turbolenza

3.1 Caratteristiche dell'analisi CFD

3.2 Modellazione della turbolenza: Tecnica RANS

3.2.1 – Introduzione

3.2.2 – Descrizione dell'approccio RANS

3.3 Modellazione della turbolenza: Tecnica LES

3.3.1 – Introduzione

3.3.2 – Operazioni e tipi di filtraggio LES

3.3.3 – Equazioni filtrate di bilancio per simulazioni LES

3.3.4 – Modellazione delle scale di sottogriglia – Il modello di Smagorinsky

4 Approccio alla modellazione della combustione non-premiscelata

4.1 Caratteristiche della combustione non-premiscelata

4.2 Modelli di combustione non – premiscelata utilizzati

4.2.1 – *Modelli Eddy Dissipation ed Eddy Dissipation – Finite Rate*

4.2.2 – *Steady Laminar Flamelet Model*

4.2.2.1 – *Introduzione*

4.2.2.2 – *Frazione di miscela*

4.2.2.3 – *Teoria del modello Flamelet – Equazioni di campo*

4.2.2.4 – *Teoria del modello Flamelet – Equazioni delle Flamelets*

4.2.3 – *Modelli di combustione all'equilibrio*

4.2.4 – *Unsteady Flamelet Model*

5 *La combustione di gas a basso potere calorifico all'interno di MTG*

5.1 Produzione, caratteristiche ed applicazioni dei “low-BTU gas” analizzati

5.1.1 – *Gas derivanti dalla pirolisi di biomasse – Il “Singas”*

5.1.2 – *L'impianto di pirolisi per la produzione del Singas*

5.2 Caratteristiche delle MTG per applicazioni cogenerative

6 *Descrizione dei domini geometrici analizzati*

6.1 Camera sperimentale di laboratorio

6.1.1 – *Descrizione*

6.1.2 – *Realizzazione della griglia di calcolo*

6.1.3 – *Determinazione delle condizioni al contorno*

6.2 Combustore della MTG sperimentale Elliot 80

6.2.1 – *Descrizione della prima geometria (MTG1) e della griglia di calcolo*

6.2.2 – *Determinazione delle condizioni al contorno*

6.2.3 – *Descrizione della seconda geometria (MTG2) e della griglia di calcolo*

6.2.4 – *Modifica delle condizioni al contorno*

7 *Simulazioni eseguite sulla camera sperimentale di laboratorio*

7.1 Simulazioni RANS – Variazioni del combustibile e dei modelli di combustione

7.1.1 – *Impostazioni e simulazioni RANS del campo di moto a freddo*

7.1.2 – *Simulazioni della combustione con modelli Flamelet*

7.1.2.1 – *Fase di pre-processing*

7.1.2.2 – *Applicazione del modello Laminar Steady Flamelet*

7.1.2.3 – *Applicazione del modello Unsteady Flamelet*

7.1.3 – *Simulazioni della combustione con modelli ED ed ED-FR*

7.1.4 – *Analisi dei risultati delle simulazioni RANS*

7.1.4.1 – *Risultati delle simulazioni a freddo*

7.1.4.2 – *Risultati delle simulazioni a caldo*

7.1.4.3 – *Emissioni inquinanti*

7.2 Simulazione LES

- 7.2.1 – *Scelte adottate nella simulazione*
- 7.2.2 – *Descrizione ed impostazioni della simulazione*
- 7.2.3 – *Risultati della simulazione LES. Confronto con i risultati RANS e Sperimentali*

8 Simulazioni eseguite sulla MTG sperimentale

8.1 Simulazioni della combustione “ricca-povera” con MTG a pieno carico. Geometria MTG1

- 8.1.1 – *Simulazioni RANS con modelli Flamelet ed EDR. Confronto Singas-Metano*
- 8.1.2 – *Analisi dei risultati ed emissioni inquinanti*

8.2 Simulazioni della combustione “ricca-povera” con MTG a pieno carico. Geometria MTG2

- 8.2.1 – *Confronto fra le impostazioni delle geometrie MTG1 ed MTG2*
- 8.2.2 – *Analisi dei risultati a pieno carico: Geometria MTG2*

8.3 Parzializzazione dei carichi della MTG. Simulazioni della combustione “ricca-povera”

- 8.3.1 – *Impostazione delle simulazioni ai carichi parziali*
- 8.3.2 – *Risultati ai carichi parziali*

9 Conclusioni

10 Simbologia

11 Bibliografia

INTRODUZIONE

Obbiettivi dello studio

La stesura di questo lavoro finale di tesi riassume l'attività svolta nei tre anni di dottorato. Essa pone rilievo sui principali risultati ottenuti dall'analisi numerica di combustione applicata allo studio di combustibili rinnovabili derivanti da biomasse. In particolare, il lavoro è stato orientato alla determinazione delle proprietà di combustione di gas di sintesi caratterizzati dall'aver un basso potere calorifico. Tali gas, alla loro più debole attitudine a liberare energia termica in combustione contrappongono la preziosa caratteristica della rinnovabilità; essa consiste nella continua possibilità di utilizzo negli odierni sistemi energetici senza incorrere nel principale problema dei combustibili fossili che ad oggi è quello della quantità esauribile e limitata. L'utilizzo di questi combustibili alternativi, denominati singas, è ancora unicamente relegato a sistemi energetici di piccola taglia a causa delle limitate prestazioni come combustibile e a causa della necessità di disporre di ingenti quantitativi di biomassa per la sua produzione. A questo si aggiunge una maggiore complessità ed ingombro degli impianti, la cui descrizione è approfondita in questo lavoro, che si riflette sull'attuale scarso rendimento finale di conversione elettrica. Si ritiene, però, che tutte le problematiche indicate possano essere affrontate e ottimizzate, nell'ottica di estendere ai sistemi energetici di piccola taglia l'utilizzo di combustibili alternativi da contrapporre all'uso del gas naturale che, nell'attuale panorama impiantistico italiano e internazionale risulta insostituibile. La ricerca, condotta sullo sviluppo delle prestazioni di questi combustibili derivanti da biomassa, diventa allora di primaria importanza ed in tal senso va sottolineato l'estrema attualità della ricerca mirata al miglioramento degli impianti di piccola potenza. Essi costituiscono ad oggi i protagonisti della cogenerazione distribuita che in questi anni è permeata capillarmente sul territorio italiano e nelle singole realtà industriali diventando espressione della volontà industriale e civile di risparmio energetico. Gli impianti espressamente considerati in questo lavoro appartengono alla classe di impianti citati, adatti alla piccola generazione distribuita; in tali sistemi si ha l'applicazione cogenerativa di microturbine a gas capaci di produrre congiuntamente energia elettrica e termica mediante la combustione di singas derivante dalla pirolisi di biomasse o, in alternativa, gas naturale. Il confronto fra i diversi tipi di alimentazione trattato nella tesi vuole indagare su un altro importante pregio del singas rinnovabile, ovvero la possibilità di produrre emissioni inquinanti più contenute che contribuiscono a rendere ancor più interessante queste applicazioni.

Le prestazioni dei combustibili derivanti da biomasse è stato analizzato nel corso dei tre anni ricorrendo all'utilizzo dell'analisi numerica. Il lavoro si articola nella descrizione delle tecniche di analisi numerica e dei modelli di turbolenza e combustione ad oggi disponibili nei codici commerciali di calcolo. Questi codici, risultano ormai tanto diffusi da poter essere considerati strumenti di ricerca da un lato, ed allo stesso tempo indispensabili al mondo industriale che li utilizza correntemente nei più svariati campi della tecnica compreso lo studio di combustione. La ricerca, volta a determinare le possibilità di applicazione dell'analisi numerica alla combustione del singas, diventa perciò fondamentale per estendere anche al mondo industriale le possibilità di sviluppo di questo tipo di impianti di piccola taglia. E' infatti il mondo industriale e civile che, comprese le possibilità di questi combustibili, potrà investire sull'installazione di impianti cogenerativi distribuiti sul territorio. Queste utenze finali, sostenendo l'onere economico in vista di un utile futuro svilupperanno contemporaneamente una coscienza delle possibilità di risparmio energetico mediante l'utilizzo delle nuove tecnologie che la ricerca ha proposto loro.

Sommario

Il presente lavoro si occupa dell'analisi numerica di combustione di gas a basso potere calorifico (gas di sintesi derivanti da pirolisi di biomasse). L'analisi è stata condotta su due principali geometrie di camera di combustione. La prima è un bruciatore sperimentale da laboratorio adatto allo studio delle proprietà di combustione del singas. Esso è introdotto in camera separatamente rispetto ad una corrente d'aria comburente al fine di realizzare una combustione non-premiscelata diffusiva in presenza di *swirl*. La seconda geometria presa in considerazione è la camera di combustione anulare installata sulla microturbina a gas Elliott TA 80 per la quale si dispone di un modello installato al banco al fine dell'esecuzione di prove sperimentali.

I principali obiettivi conseguiti nello studio sono stati la determinazione numerica del campo di moto a freddo su entrambe le geometrie per poi realizzare simulazioni in combustione mediante l'utilizzo di diversi modelli di combustione. In particolare è stato approfondito lo studio dei modelli *steady laminar flamelet* ed *unsteady flamelet* con cui sono state esaminate le distribuzioni di temperatura e delle grandezze tipiche di combustione in camera, confrontando i risultati numerici ottenuti con altri modelli di combustione (*Eddy Dissipation* ed *ED-FR*) e con i dati sperimentali a disposizione. Di importanza fondamentale è stata l'analisi delle emissioni inquinanti, realizzata per entrambe le geometrie, che mostra l'entità di tali emissioni e la loro tipologia. Relativamente a questo punto, il maggior interesse si sposta sui risultati ottenuti numericamente nel caso della microturbina, per la quale sono a disposizione misure di emissione ottenute sperimentalmente. Sempre per questa geometria è stato inoltre eseguito il confronto fra microturbina alimentata con singas a confronto con le prestazioni emissive ottenute con il gas naturale.

Nel corso dei tre anni, l'esecuzione delle simulazioni e l'analisi critica dei risultati ha suggerito alcuni limiti e semplificazioni eseguite sulle griglie di calcolo realizzate per lo studio numerico. Al fine di eliminare o limitare le semplificazioni o le inesattezze, le geometrie dei combustori e le griglie di calcolo sono state migliorate ed ottimizzate. In merito alle simulazioni realizzate sulla geometria del combustore della microturbina Elliott TA 80 è stata condotta dapprima l'analisi numerica di combustione a pieno carico per poi analizzare le prestazioni ai carichi parziali. Il tutto appoggiandosi a tecniche di simulazione RANS ed ipotizzando alimentazioni a gas naturale e singas derivato da biomasse.

Nell'ultimo anno di dottorato è stato dedicato tempo all'approfondimento e allo studio della tecnica Large Eddy Simulation per testarne una applicazione alla geometria del bruciatore sperimentale di laboratorio. In tale simulazione è stato implementato l'*SGS model* di Smagorinsky-Lilly completo di combustione con modelli *flamelet*. Dai risultati sono stati estrapolati i profili di temperatura a confronto con i risultati sperimentali e con i risultati RANS. Il tutto in diverse simulazioni a diverso valore del *time-step* imposto. L'analisi LES, per quanto migliorabile, ha fornito risultati sufficientemente precisi lasciando per il futuro la possibilità di approfondire nuovi modelli adatti all'applicazione diretta sulla MTG.

1 LA COMBUSTIONE DI GAS A BASSO POTERE CALORIFICO ALL'INTERNO DI MTG (Microturbine a gas)

1.1 Produzione, caratteristiche ed applicazioni dei “low-BTU gas” analizzati

1.1.1 – Gas derivati dalla pirolisi di biomasse – Il “Singas”

Il singas è un gas che si può ottenere dalla degradazione ad alta temperatura di sostanze organiche, contenenti carbonio, idrogeno ed ossigeno. In questi termini si ottiene singas dalla degradazione o disgregazione termochimica di piante o scarti di esse, residui animali o vegetali, legno carta plastiche o residui industriali o fognari in genere fino ad arrivare all'estrazione di singas dagli scarti di macellazione. Questo gas possiede pertanto la preziosa caratteristica di essere rinnovabile in quanto rinnovabili sono le sostanze organiche da cui viene generato (si pensi, ad esempio, ai rifiuti solidi urbani) e questa caratteristica è il principale incentivo che spinge allo studio e alla messa a punto di sistemi energetici capaci di sfruttarne al meglio il potenziale energetico per tentare di proporre una alternativa valida ai tradizionali combustibili fossili destinati all'esaurimento.



Per l'estrazione di un gas di sintesi occorre dunque un processo a temperature comprese fra gli 800°C e i 1200°C che dipende dalla tipologia di materiale di scarto che alimenta la produzione. L'alta temperatura ha il compito di rompere i legami chimici e le lunghe catene di molecole tipiche delle sostanze organiche di origine vegetale o animale per separare da esse piccole molecole di idrogeno, carbonio o derivati di esse in forma gassosa (principalmente il CO) capaci di partecipare ad un successivo processo di combustione. Occorre in fase di produzione del singas evitare la combustione spontanea del gas in fase di formazione e questo si realizza eseguendo il deperimento ad alta temperatura delle biomasse organiche in assenza di ossigeno all'interno di reattori appositi. L'assenza del comburente assicura la produzione del gas senza che esso bruci nel reattore sprecando il riutilizzo del prodotto all'interno di un sistema energetico.

Il gas di sintesi può essere prodotto principalmente attraverso due procedimenti basilari che sono la pirolisi e la gassificazione. Per pirolisi si intende propriamente la degradazione termochimica di materiale organico in assenza di ossigeno ed aria mentre con il processo di gassificazione si intende la scomposizione del materiale organico con riconversione delle molecole in singas in una atmosfera nella quale è presente una esigua quantità di ossigeno (molto rarefatto) e nella quale sono quindi importanti opportuni controlli per evitare l'autocombustione del prodotto.

Il singas che può essere ottenuto da un processo di pirolisi può essere composto da una vasta gamma di combinazioni di molecole diverse. Alcuni singas, fra i più semplici, possono essere costituiti da soltanto due o tre tipologie di componenti ad elevata frazione in massa rispetto alla miscela totale; questo è il caso di pirolizzazioni eseguite su biomasse semplici ed unificate come il legno, la carta o altri materiali particolarmente omogenei. Molto diverso invece il caso nel quale si esegua il processo di pirolisi su materiale disomogeneo o complesso come rifiuti solidi urbani, scarti molto diversificati o plastiche in quanto il singas ottenuto in tali processi è composto di molti componenti, talvolta in parte incombustibili e comunque diversificati fra loro. Questo genera

problemi di controllo della composizione del gas e quindi di controllo delle sostanze potenzialmente pericolose all'interno dell'atmosfera calda del reattore di pirolisi. In conclusione, in base al tipo di materiale utilizzato e delle temperature raggiungibili l'impianto può risultare più o meno complesso costruttivamente e dal punto di vista del controllo. La pirolisi delle biomasse assicura, in genere, impianti abbastanza semplici caratterizzati da un funzionamento costante e robusto, motivo per cui sono spesso scelti per i test sperimentali sulla pirolisi o sulla successiva utilizzazione del singas. I test su cui il presente lavoro si basa sono realizzati su di un pirolizzatore alimentato a biomasse vegetali che sarà descritto nel successivo paragrafo 4.1.2. La scelta di questo impianto è infatti strategica per l'ottenimento in sicurezza di singas dalla semplice composizione percentuale (basata sul 56% in massa di CO₂, 27% in massa di CO e restanti frazioni di idrogeno ed ossigeno). La volontà è infatti quella di produrre agevolmente il singas per studiarne le successive proprietà di combustione.



Fig 1.2

1.1.2 – L'impianto di pirolisi per la produzione del syngas

L'analisi numerica di combustione presa in esame nei tre anni di dottorato di ricerca pone principalmente l'attenzione sulle potenzialità della combustione di gas a basso potere calorifico e sulle proprietà che questi gas possiedono, in modo da creare una alternativa ai tradizionali combustibili fossili che, fino a pochi anni fa, costituivano l'unica soluzione per l'alimentazione dei combustori di MTG per la produzione elettrica. Nonostante questo scopo principale è necessario capire il sistema energetico complessivo in cui questi combustori si inseriscono. Mentre infatti i combustibili fossili tradizionali sono normalmente a disposizione come prodotto pronto all'uso, i gas " low-BTU" devono ancora oggi essere prodotti dall'utilizzatore in processi posti subito a monte delle macchine capaci di realizzare la combustione. In questo paragrafo verrà perciò descritto il sistema energetico di produzione e combustione del singas nel suo insieme mettendone in evidenza i componenti principali e le prestazioni complessive.

Un impianto di produzione e combustione del singas può essere schematizzato nel seguente modo [27][28]:

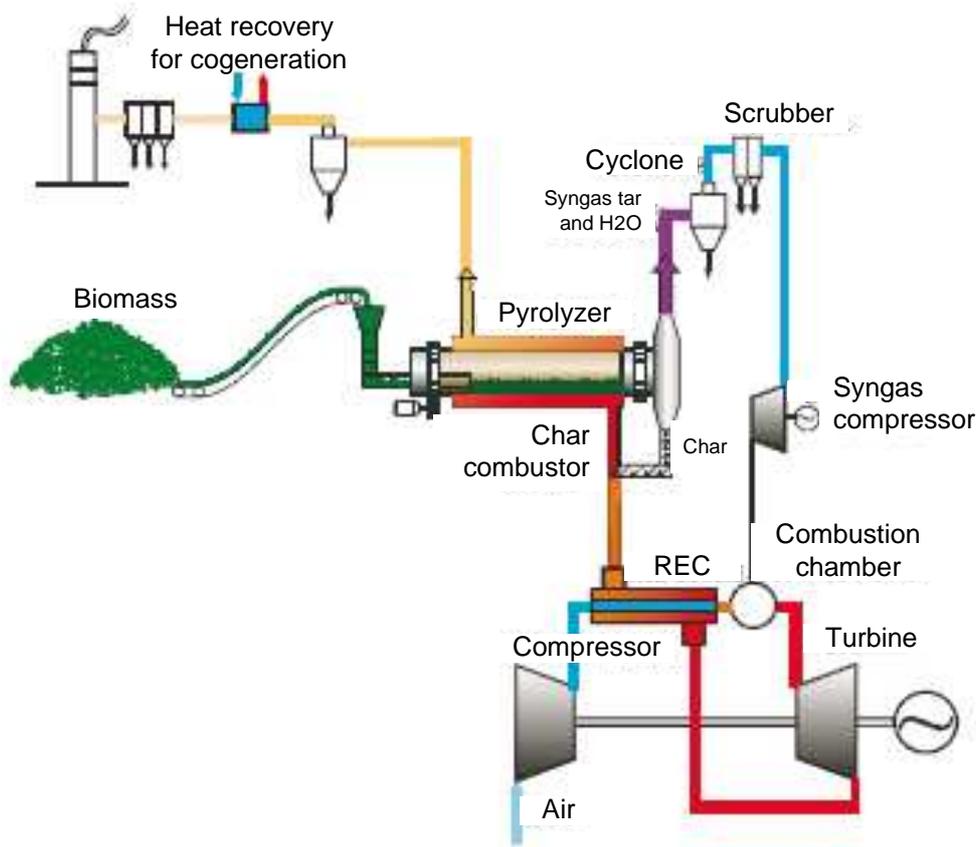


Fig 1.3

La biomassa, di origine vegetale o animale, viene stoccata a monte dell'impianto e appositi sistemi di movimentazione provvedono ad introdurla all'interno del componente principale dell'impianto: il pirolizzatore (*Pyrolizer* in Fig 4.3). Il pirolizzatore è sicuramente il più importante componente del sistema energetico in quanto è il sistema capace di liberare il syngas dalle biomasse di scarto. Il suo funzionamento è infatti approfondito nel seguito. Per ora basti indicare che la biomassa subisce un processo termochimico di pirolisi capace di liberare gas potenzialmente pregiato per una combustione. La rimanente massa solida viene bruciata per recuperarne calore utile al riscaldamento del pirolizzatore ed infine evacuata come sottoprodotto di scarto o cenere (*char*) che dovrà essere opportunamente smaltita come rifiuto industriale. Il syngas viene recuperato per mezzo di un opportuno organo separatore di ceneri ed inviato ad una serie di componenti (*Cyclone*, *Scrubber*) che provvedono a filtrare, pulire ed affinare il gas da pirolisi eliminando da esso le particelle solide in sospensione e l'umidità. In questa fase viene quindi preparato il gas per renderlo il più possibile idoneo alla successiva combustione. Il processo di pirolisi avviene tipicamente a temperatura ambiente e l'ultima fase che precede l'ingresso nelle MTG è la compressione del syngas pronto all'uso fino alla pressione di iniezione del liner della MTG, una pressione tendenzialmente oscillante attorno ai 4 bar in funzione del tipo di micro turbogas installato nell'impianto. Con l'introduzione in camera di combustione il syngas brucia con l'aria in arrivo dal turbocompressore della MTG liberando la sua energia chimica e trascinando la turbina di potenza. Su quest'ultima è calettato un alternatore per la produzione dell'energia.

Un prototipo del sistema energetico sperimentale del tipo descritto è installato, a scopo di ricerca, presso l'Università di Perugia; la MTG a gas installata è una MTG Elliot TA 80 capace di erogare

una potenza all'alternatore di 80 kW nominali ad una velocità di rotazione di 68000 giri al minuto nelle condizioni di pieno carico. Ottenuto l'effetto utile di trascinamento dell'alternatore i gas esausti uscenti dal singolo stadio di espansione della MTG non vengono direttamente portati a camino ma riutilizzati per incrementare le prestazioni del gruppo. Essi infatti possiedono ancora un interessante contenuto entalpico che viene sfruttato in uno scambiatore a recupero (rigenerativo) per preriscaldare l'aria uscente dal turbocompressore prima dell'ingresso nel bruciatore della MTG. Questo porta ad un incremento delle prestazioni del gruppo di potenza, altrimenti scarse a causa della piccola taglia. A valle del preriscaldamento dell'aria segue, come ultimo recupero termico realizzabile, la cessione del calore residuo dei fumi al pirolizzatore descritto inizialmente per fare in modo di mantenere la temperatura di questo componente sufficientemente elevata affinché possa avere luogo il processo di pirolisi all'interno. Infine, i fumi ormai esausti, vengono convogliati a camino ed evacuati in atmosfera.

Dalla descrizione presentata, si individua l'importanza fondamentale assunta dai due principali componenti dell'impianto: il *pirolizzatore* e la *microturbina a gas*.

Mentre la microturbina a gas sarà diffusamente descritta nei capitoli 5 e 7 con la trattazione delle simulazioni numeriche di combustione del singas, è ora opportuno prendere in esame il funzionamento del pirolizzatore sotto rappresentato schematicamente:

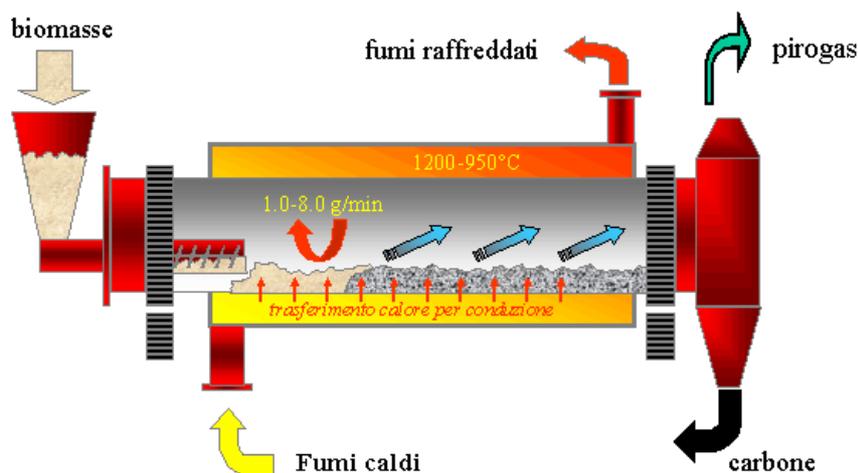


Fig 1.4

La biomassa portata al reattore di pirolisi viene raccolta da una tramoggia di ingresso e poi, tramite una coclea, introdotta nel tamburo rotante.

Il tamburo è isolato e realizzato a tenuta stagna per permettere un processo anaerobico e viene riscaldato tramite una caldaia a griglia che riceve calore dai fumi di scarico della MTG, come descritto in precedenza. Oltre a questo sistema di riscaldamento è presente anche un bruciatore ausiliario per permettere il riscaldamento del tamburo nelle fasi di avviamento impianto e per coprire eventuali punte di richiesta di calore.

La temperatura della biomassa aumenta durante il transito lungo il tamburo (si passa dai 100 ÷ 120°C iniziali, fino ai 600 °C in prossimità dell'estremità di uscita dei gas), la cui rotazione ne determina l'avanzamento grazie ad una serie di pale studiate per ottenere un effetto di trascinamento del materiale introdotto. Durante il processo di riscaldamento, il calore innesca una serie di reazioni

chimico-fisiche che portano la biomassa a trasformarsi lungo il percorso, secondo i passaggi riportati di seguito :

- essiccamento (100 ÷ 120 °C);
- deossigenazione (250 °C);
- rottura legami alifatici (340 °C);
- formazione carbone (380 °C);
- rottura legami C-O e C-H (400 °C);
- formazione oli e tar (400 ÷ 600 °C);
- post combustione (950 ÷ 1200 °C).

Al termine del percorso di traslazione nel tamburo rotante, quindi, dalla biomassa è ricavata la sua parte volatile (singas) mentre la parte solida viene trasformata in carbone.

I gas vengono estratti ed inviati al processo di lavaggio e raffreddamento, mentre il carbone viene raccolto e trasportato tramite coclee alla suddetta caldaia a griglia, situata sotto il tamburo, dove viene bruciato per generare parte del calore necessario a sostenere le temperature nel tamburo rotante. Questo calore, a cui si aggiunge il calore recuperato dai gas di scarico della MTG assicurano le temperature necessarie per sostenere il processo termochimico di pirolisi.

I gas sviluppati dalla disgregazione delle biomasse hanno un potere calorifico inferiore che dipende dalla biomassa trattata a disposizione. Nel caso dell'impianto sperimentale installato a scopo di ricerca il PCI raggiunge valori prossimi a 9100 kJ/kg.

La parte dei fumi caldi in uscita dalle microturbine, in particolare, viene principalmente sfruttata nelle fasi iniziali della pirolisi per deumidificare la biomassa in ingresso e portarla quindi alla percentuale di umidità idonea per l'utilizzo nel reattore.

I vantaggi dell'applicazione di questa tecnologia si possono riassumere nei seguenti punti:

- riduzione delle emissioni di CO₂ in atmosfera;
- annullamento dell'inquinamento batterico/proteico;
- valorizzazione delle biomasse;
- riduzione/annullamento dei costi per i combustibili fossili;
- riduzione dei costi di logistica e trasporto delle biomasse per eventuali smaltimenti;
- considerevole efficienza termica ed elettrica d'impianto;
- accessibilità agli incentivi legislativi di settore (“certificati verdi”);
- innovazione utilizzante componentistica consolidata.

Le prestazioni dell'impianto esaminato possono essere riassunte in Tabella 1.1 da cui si può notare un consumo di circa 730 tonnellate all'anno che generano una produzione di singas mediamente pari a 22 kg/h da inviare alla MTG. Nel funzionamento a pieno carico, inoltre, gli 80 kW elettrici

prodotti vengono in parte utilizzati per il funzionamento di tutti gli ausiliari di impianto. Questo porta ad una potenza elettrica complessivamente fruibile di 65 kW [27][28]:

**Layout del sistema integrato
PIROLIZZATORE – MTG**

PRESTAZIONI	VALORE	U.D.M
<i>Potenza elettrica netta</i>	65	kW
<i>Consumo di biomassa</i>	730	ton/anno
<i>Produzione elettrica annua</i>	400.000	kWh
<i>Rendimento di conversione</i>	18.8 %	-
<i>CO2 evitata</i>	290	ton/anno

Tab 1.1

1.2 Caratteristiche delle MTG per applicazioni cogenerative

La cogenerazione, o generazione distribuita, consiste nella produzione combinata di energia elettrica e termica (eventualmente anche frigorifera) per mezzo di uno stesso motore primo alimentato con un combustibile, solitamente di origine fossile o alternativo. Il risparmio energetico conseguibile in regime di cogenerazione deriva proprio dal migliore sfruttamento dell'energia chimica messa a disposizione dal combustibile di partenza. Infatti da esso si produce energia elettrica, come in un sistema tradizionale con rendimenti tipici dei diversi motori primi, e si recupera al meglio anche l'energia termica che rappresenterebbe lo scarto di produzione. Si conferisce quindi all'energia termica un valore aggiunto impiegandola per il riscaldamento in campo civile ed industriale oppure come calore tecnologico disponibile per processi industriali. L'utilizzo dell'energia termica deve essere garantito, in genere, a breve distanza dal suo luogo di produzione, e questo spiega il termine "generazione distribuita" che descrive i sistemi di produzione combinati di energia come tanti sistemi dislocati sul territorio in corrispondenza di aggregati industriali o civili che necessitano dell'energia termica prodotta.

Le prestazioni di un sistema cogenerativo sono individuabili tramite indici che quantificano l'effettivo risparmio energetico realizzato da un sistema cogenerativo rispetto al tradizionale utilizzo di energia elettrica di rete e alla tipica produzione di calore a mezzo di tradizionali caldaie.

In funzione della taglia dell'impianto cogenerativo che si desidera realizzare, ovvero della potenza elettrica e della potenza termica di cui si necessita, è possibile ricorrere a diverse tipologie impiantistiche e a una scelta di motore primo specifica, quella che consente per la taglia scelta le migliori prestazioni. La tabella 1.5 fornisce informazioni di carattere generale sulla scelta consigliata al variare delle prestazioni che si vorrebbero ottenere dal sistema cogenerativo.

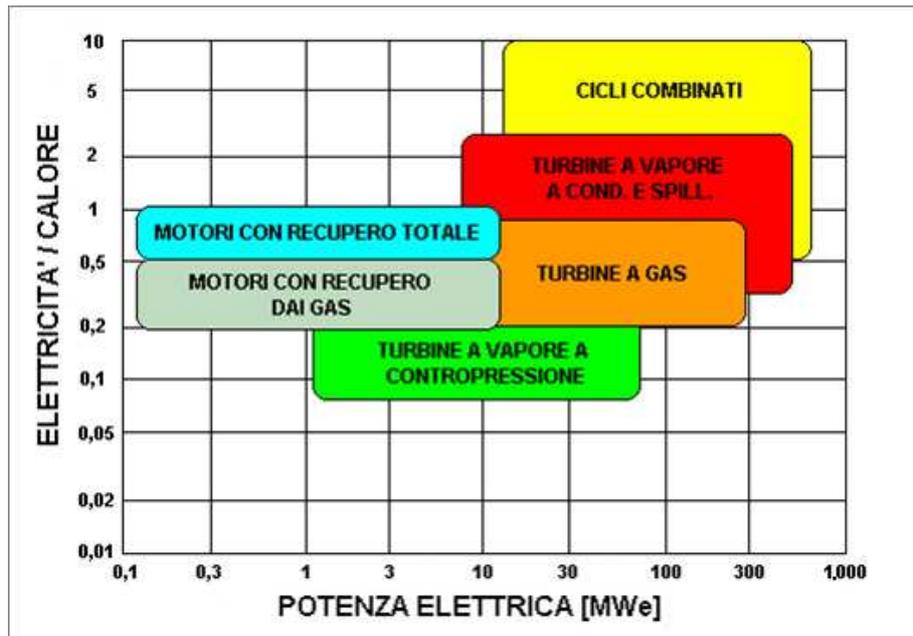


Fig 1.5

Nel caso delle Microturbine a gas, oggetto di questo lavoro, si ricade nel campo di produzione di potenze elettriche che vanno generalmente da poche decine di kW_{el} ad 1 MW_{el}, quindi all'estremo sinistro del grafico nella parte bassa.

Nelle applicazioni cogenerative con MTG si hanno in genere più turbomacchine montate su *skids* separati di tipo modulare; in ognuno di essi il flusso di gas di scarico uscente dalle turbine viene utilizzato per produrre acqua calda per uso sanitario o per il riscaldamento ambienti, oppure viene utilizzato per alimentare gruppi frigoriferi ad assorbimento per la produzione di acqua refrigerata 9÷12 °C per il raffrescamento ambienti. Alcune applicazioni di MTG basate sulla produzione combinata di energia elettrica e termica danno la possibilità di by-passare l'eventuale presenza di un rigeneratore dell'aria in ingresso alla camera di combustione. In questo modo, in assenza di richiesta termica il calore di scarico è utilizzabile per preriscaldare l'aria in uscita al compressore con l'obiettivo di incrementare il rendimento elettrico della macchina, mentre nel caso di elevata richiesta termica dall'utente tutto il flusso di gas caldi può essere impiegato per soddisfare questa richiesta. Il principale *layout* utilizzato nei sistemi cogenerativi con MTG è sotto rappresentato:

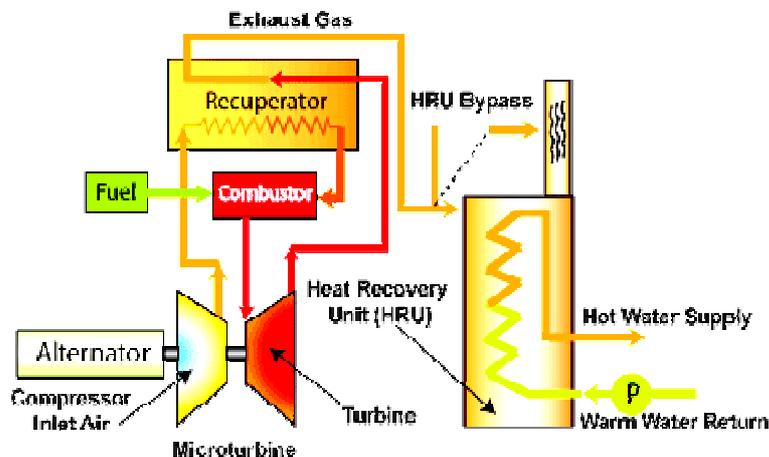


Fig 1.6

Dal confronto del layout di figura 1.6 con il tipico layout di un impianto cogenerativo con turbina a gas di grande taglia se ne evidenzia anzitutto la radicale diversità concettuale. Le turbine a gas presenti nel mercato industriale mostrano una vera competitività economica ed energetica per installazioni che riguardano gruppi di potenza superiore ai $5 \div 10 \text{ MW}_{el}$, mentre scendendo a taglie di 1 MW_{el} o inferiori si notano il decadimento dei rendimenti di produzione e una crescita dei costi per unità di potenza quasi esponenziale.

Gli impianti a turbina a gas, seppur cogenerativi, non risultano quindi economicamente ed energeticamente competitivi sotto i $5 \div 10 \text{ MW}_{el}$ e pertanto l'impiego delle Microturbine a gas per la generazione di potenza elettrica e termica su piccola scala è una realtà sicuramente innovativa che diventa una tecnologia primeggiante nel campo di potenze comprese fra 30 kW_{el} e 1 MW_{el} . In tale campo infatti risultano difficilmente competitivi anche i gruppi cogenerativi con motore endotermico a combustione interna che, riducendosi a taglie molto piccole non possiedono i rendimenti vantaggiosi che mostrano invece nel *range* $1 \div 5 \text{ MW}_{el}$ dove sono sempre utilizzati.

Il motivo che spiega la scarsa competitività delle turbine a gas rispetto alle MTG alle piccole scale di potenza, risiede nel fatto che la costruzione di modelli in scala delle unità turbogas più grandi (operando sempre in ciclo semplice e con compressore e turbina assiali) aumenta le perdite termodinamiche fino a valori intollerabili mentre le microturbine a gas si basano su un completo ripensamento dell'architettura che vince questi limiti. Esse si basano sull'impiego di un ciclo rigenerativo e di turbomacchine radiali di piccole dimensioni, capaci quindi di funzionare ad un numero di giri elevatissimo. In linea del tutto orientativa, si possono ritenere plausibili velocità di rotazione dell'ordine dei 100.000 giri al minuto con diametri delle giranti di 60 mm . Oltre a questo, la riduzione spinta della dimensione radiale delle giranti porta non trascurabili benefici economici.

In queste condizioni di funzionamento un singolo stadio centrifugo può realizzare rapporti di compressione (o di espansione per uno stadio centripeto di turbina) di $4 \div 6$, valori già sufficienti ad ottenere un ciclo efficiente.

L'adozione di turbomacchine radiali monostadio comporta quindi, ai fini del ciclo termodinamico, rapporti di compressione sensibilmente inferiori rispetto a quelli comunemente usati nei cicli di turbina a gas tradizionali (da 10 a 15 per turbine industriali a più stadi).

Nel caso di un ciclo semplice tipico delle MTG, a parità di temperatura massima del ciclo, che corrisponde alla temperatura del gas in ingresso alla turbina (TIT), l'impiego di un basso rapporto di compressione comporterebbe una temperatura di scarico dei gas dalla turbina molto alta, unita ad una temperatura di ingresso nel combustore assai ridotta, due condizioni che causano un decadimento rendimento termodinamico η_{th} compatibile con l'utilizzo cogenerativo del calore espulso dalla turbina.

Nel caso di assenza di richiesta termica da parte dell'utilizzatore ultimo l'impiego di un ciclo rigenerativo, dotato di uno scambiatore che sfrutta il calore disponibile nei gas che escono dalla turbina per preriscaldare l'aria comburente uscente dal compressore, consente di ovviare a tali inconvenienti e rende possibile un netto miglioramento della termodinamica del ciclo.

La rigenerazione diventa, quindi, una scelta obbligata e rappresenta la chiave del successo tecnico ed economico delle MTG.

La Figura 1.7 mette in evidenza come l'adozione del rigeneratore renda peraltro svantaggioso il ricorso a rapporti di compressione β più elevati.

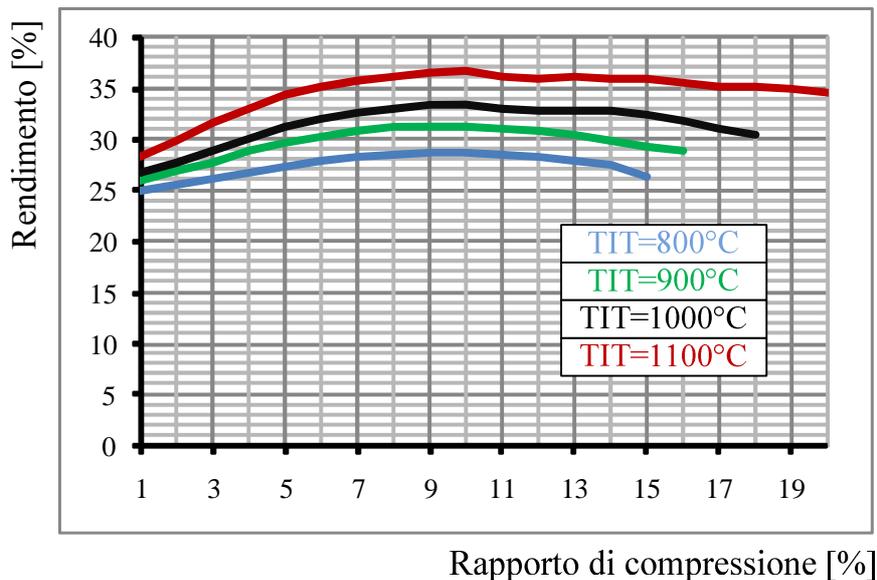


Fig 1.7

In particolare, la Figura 1.7 mostra per diversi valori della TIT, il rapporto di compressione che consente di ottenere il massimo rendimento elettrico del gruppo (ad esempio circa 4 a 900°C).

Per rapporti di compressione β molto bassi, il carico termico del recuperatore diviene eccessivo e le sue perdite risultano preponderanti; al contrario, ad alti valori del rapporto di compressione le perdite causate dall'inefficienza delle turbomacchine, crescenti in proporzione al lavoro svolto e quindi crescenti con β , giustificano un calo del rendimento.

In ultimo è da notare l'effetto benefico di un aumento della TIT: il rendimento ottimo cresce di circa 10 punti percentuali passando da 800°C a 1200°C .

Per evitare l'uso di riduttori le MTG sono libere di ruotare alla velocità più conveniente in base alla condizione di carico elettrico da sviluppare. Grazie all'adozione del sistema di conversione della frequenza, il turbogeneratore può funzionare a qualsiasi numero di giri correggendo a valle della produzione la frequenza per portarla ai valori richiesti per il parallelo con la rete elettrica.

Il grado di libertà consentito dalla velocità di rotazione variabile permette di limitare notevolmente il marcato decadimento delle prestazioni ai carichi parziali tipico delle turbine a gas; tale possibilità riveste notevole importanza, visto che nel funzionamento cogenerativo può essere necessario inseguire i carichi imposti dall'utenza.

2 APPROCCIO TEORICO ALLA FLUIDODINAMICA

2.1 Strumenti matematici e principali equazioni utilizzate

2.1.1 - Equazione generica di trasporto

Si consideri una generica quantità scalare ϕ che identifichi una proprietà intensiva del flusso. Questa variabile può essere definita nello spazio fluido tridimensionale generato dalle tre coordinate spaziali x, y, z . Questa generica quantità scalare potrà, nel caso più generale, variare in funzione dello spazio e del tempo t secondo la seguente espressione:

$$\phi = \phi(x, y, z, t)$$

Prendendo in considerazione un generico volume di controllo fluido V , le corrispondenti proprietà estensive possono essere calcolate come:

$$\phi = \int \rho \phi dV$$

Dove con ρ si è indicata la densità puntuale del fluido.

Si vuole ora esprimere il bilancio globale del generico scalare ϕ sul volume V preso in esame [3]. A questo scopo occorre prendere in considerazione tutti i possibili avvenimenti che possono portare ad una variazione di ϕ .

In generale la variazione globale della grandezza ϕ all'interno di V può avvenire secondo tre processi principali:

- 1) Variazioni di ϕ dovuti ad eventuali flussi (entranti o uscenti) attraverso la superficie di contorno del volume V , che sarà indicata con S_V . Questi flussi vengono indicati come **trasporto convettivo**.
- 2) Diffusione nello spazio dello scalare ϕ dovuto ad eventuali gradienti di ϕ nello spazio tridimensionale all'interno di cui V si trova. Questo processo è indicato come **trasporto diffusivo** (entrante o uscente) attraverso la superficie di contorno del volume V e dipende da un coefficiente detto "coefficiente di diffusione" indicato con D_ϕ .
- 3) Eventuali sorgenti o pozzi dello scalare ϕ presenti all'interno del volume di controllo che provocano rispettivamente una generazione o una distruzione dello scalare in esame. L'entità della generazione o distruzione di ϕ è funzione del coefficiente S_ϕ detto "termine sorgente locale per unità di volume".

Il bilancio globale del generico scalare ϕ sul volume di controllo V può essere quindi formalizzato esprimendo matematicamente la seguente relazione:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \int_{S_V} \rho \phi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{S_V} D_\phi \cdot \text{grad}(\phi) \cdot \mathbf{n} dS + \int_V S_\phi dV$$

Dove:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV \quad : \quad \text{Variazione locale di } \phi \text{ nel volume } V.$$

$\int_{S_V} \rho \phi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS$: Trasporto convettivo attraverso la superficie del volume V .

$\int_{S_V} D_\phi \cdot \mathbf{grad}(\phi) \cdot \mathbf{n} dS$: Trasporto diffusivo attraverso la superficie del volume V .

$\int_V S_\phi dV$: Termine sorgente dello scalare ϕ nel volume V .

In questa equazione si è indicato con \mathbf{u} il generico vettore velocità del campo di moto relativo ad ogni volume fluido infinitesimo a contatto con la superficie S_V del volume di controllo. Per ottenerne il flusso entrante (o uscente) se ne considera la sola componente normale alla superficie di controllo attraverso il versore normale ad essa, \mathbf{n} .

Dall'espressione generale di bilancio della generica grandezza ϕ si può ora ricavarne l'espressione differenziale valida perciò per ogni volume fluido infinitesimo del dominio considerato. Derivando l'espressione generale si giunge alla seguente equazione vettoriale:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \mathbf{grad}(\rho \phi \mathbf{u}) = \mathbf{grad}(D_\phi \cdot \mathbf{grad}(\phi)) + S_\phi$$

Gli operatori *gradiente* possono inoltre essere esplicitati nelle tre direzioni spaziali x, y, z ottenendo una espressione cartesiana dell'equazione differenziale di trasporto:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \phi \mathbf{u}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\left(D_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}}\right) + S_\phi$$

dove vale: $\mathbf{x} = (x, y, z)$

L'equazione sopra riportata esprime la struttura dell'equazione di trasporto che differisce dall'equazione generale di trasporto nel solo termine diffusivo. Mentre secondo questa equazione la diffusione è guidata esclusivamente dal gradiente di ϕ , esistono casi nei quali il trasporto diffusivo può essere influenzato da altri fenomeni capaci di accelerare (o rallentare) il processo diffusivo. Nel caso più generale si tiene allora conto di queste velocità di diffusione introducendo, al posto del gradiente di ϕ , il "vettore di diffusione molecolare" \mathbf{V}_{D_ϕ} capace di rappresentare la velocità con cui le proprietà puntuali del flusso diffondono nel fluido a livello molecolare. Questo vettore include in sé il *coefficiente di diffusione* D_ϕ .

Si ottiene quindi l'espressione della **generica equazione di trasporto**:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \phi \mathbf{u}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \phi \mathbf{V}_{D_\phi, \mathbf{x}}) + S_\phi$$

2.1.2 - Equazione di conservazione della massa

Dall'equazione generale di trasporto discendono quattro equazioni fondamentali rappresentative di vari fenomeni di trasporto più specifici. La prima di esse è l'equazione di conservazione della massa ottenibile imponendo [1], nell'equazione generale:

$$\phi = 1 \quad , \quad \mathbf{u} = (u, v, w) \quad , \quad S_\phi = 0 \quad (\text{assenza di termini sorgente})$$

sostituendo si ottiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \mathbf{u}) = 0$$

A questa equazione si giunge prendendo in esame un generico volume fluido infinitesimo che per comodità può essere considerato cubico di lati dx , dy , dz (Figura 1.1) [5]. In esso il bilancio della massa entrante ed uscente attraverso le sei facce del volume nell'intervallo di tempo infinitesimo dt deve eguagliare la massa contenuta.

In generale si può avere variazione di massa al variare dello spazio e del tempo; questo si esprime attraverso l'operatore derivata sostanziale:

$$\frac{Dm}{Dt} = \frac{\partial m}{\partial x}u + \frac{\partial m}{\partial y}v + \frac{\partial m}{\partial z}w + \frac{\partial m}{\partial t}$$

Nel volume di controllo in esame non si potrà avere variazione spaziale della massa essendo il volume in Fig.2.1 di dimensioni infinitesime. Da tale considerazione segue che:

$$\frac{Dm}{Dt} = \frac{D}{Dt} \int_V \rho \cdot dV = \frac{D\rho}{Dt} \cdot \int_V dV = \frac{D\rho}{Dt} \cdot dx dy dz$$

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial x}u + \frac{\partial \rho}{\partial y}v + \frac{\partial \rho}{\partial z}w + \frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial \rho}{\partial t}$$

$$\frac{Dm}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \cdot dx dy dz$$

Si considerino ora le sole forze agenti nella direzione x . Nel generico istante temporale dt si avranno:

- Ingresso di massa attraverso la superficie $dy dz$ secondo la componente di velocità u

$$\rho \cdot u \cdot dy dz \cdot dt$$

- Sviluppo in serie di Taylor dell'ingresso di massa attraverso la superficie opposta a distanza dx dalla precedente, secondo la componente di velocità u

$$-\left(\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx\right) dy dz \cdot dt$$

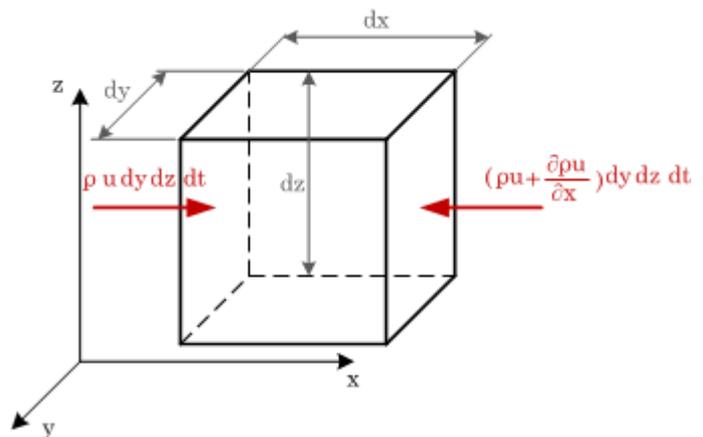


Fig 2.1

Esplicitando anche l'ingresso di massa attraverso le altre superfici del volume cubico, nelle direzioni y e z si ottiene l'espressione che rappresenta il bilancio di massa sull'intero volume di controllo:

$$\begin{aligned} & \rho v \cdot dx dz \cdot dt + \rho u \cdot dy dz \cdot dt + \rho w \cdot dx dy \cdot dt - \left(\rho v + \frac{\partial \rho v}{\partial y} dy \right) dx dz \cdot dt \\ & \quad - \left(\rho u + \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx \right) dy dz \cdot dt - \left(\rho w + \frac{\partial \rho w}{\partial z} dz \right) dx dy \cdot dt = \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz \cdot dt \\ & - \frac{\partial \rho v}{\partial y} dx dy dz \cdot dt - \frac{\partial \rho u}{\partial x} dx dy dz \cdot dt - \frac{\partial \rho w}{\partial z} dx dy dz \cdot dt = \frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz \cdot dt \\ & \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \text{con } \mathbf{u} = (u, v, w) \end{aligned}$$

Che scritto in forma cartesiana fornisce l'equazione di conservazione della massa espressa inizialmente:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \mathbf{u}) = 0$$

In essa si riconoscono i seguenti termini:

$\frac{\partial \rho}{\partial t}$: Variazione locale di massa per unità di volume

$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \mathbf{u})$: Termini convettivi dei flussi di massa attraverso il volume di controllo

Il termine sorgente S_ϕ , presente nell'equazione generale di trasporto può essere in questo caso eliminato in quanto anche trattando fenomeni di combustione, così come per i flussi non reagenti, non è possibile fisicamente generare massa all'interno del volume di controllo.

2.1.3 - Equazione di bilancio dei momenti

Un secondo importante sistema di equazioni necessario per lo studio dei fenomeni di combustione discende dalla teoria della "dinamica dei fluidi" applicando al generico volume fluido di controllo la seconda legge di Newton [1][5].

$$\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a}$$

In base alla seconda legge di Newton *la variazione totale del momento della quantità di moto di una particella fluida eguaglia la somma di tutte le forze esterne sulla particella stessa.*

Occorre pertanto:

- Individuare tutte le forze esterne che possono agire sul generico volume di controllo nelle tre direzioni dello spazio, in generale esprimibili (nella loro totalità) con il simbolo F .
- Esprimere la seconda legge di Newton in base alla definizione di massa vista nel principio di conservazione della massa e introducendo l'espressione dell'accelerazione come derivata sostanziale delle varie componenti di velocità:

In merito al primo punto le forze F possono appartenere a due tipologie principali[6]:

- **Forze di massa:** Forze che agiscono sul volume fluido preso in esame (forza di gravità, forza centrifuga, forza di Coriolis, forze elettromagnetiche)

Si indicherà la risultante di queste forze con il simbolo \mathbf{G} mentre la singola forza specifica di massa con \mathbf{f} .

- **Forze di superficie:** Forze che agiscono sulle superfici di contorno del volume in esame (forze di pressione, forze di attrito viscoso)
Si indicherà la risultante di queste forze con il simbolo $\mathbf{\Pi}$ mentre la singola forza specifica di superficie con $\boldsymbol{\sigma}$ o $\boldsymbol{\tau}$.

Tali forze possono essere espresse matematicamente come:

$$\mathbf{G} = \int_V \rho \mathbf{f} \cdot dV \quad \text{e} \quad \mathbf{\Pi} = \int_S \rho \boldsymbol{\tau} \cdot dS$$

In merito al secondo punto presentato nella precedente pagina si può esprimere la massa come:

$$m = \int_V \rho \cdot dV$$

ed il vettore accelerazione come la derivata sostanziale del vettore velocità:

$$\mathbf{a} = \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \quad \text{con} \quad \mathbf{u} = (u, v, w)$$

Si può quindi scrivere l'espressione del secondo principio della dinamica come:

$$\mathbf{F} = m \cdot \mathbf{a} \quad \rightarrow \quad \mathbf{G} + \mathbf{\Pi} = \frac{D}{Dt} \int_V \rho \mathbf{u} \cdot dV \quad \rightarrow \quad \mathbf{G} + \mathbf{\Pi} = \int_V \rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \cdot dV$$

Quanto scritto ha validità generale sul generico volume fluido di controllo finito. Si applica ora quanto visto al volume di controllo cubico ed infinitesimo esaminato nell'espressione dell'Equazione di conservazione della massa:

Si considerino le forze di massa e superficie agenti nella direzione x . Tali forze sono principalmente pressioni normali, forze tangenziali di attrito viscoso e generiche forze di massa e saranno distribuite su tutte le sei facce del volume di controllo o all'interno di esso:

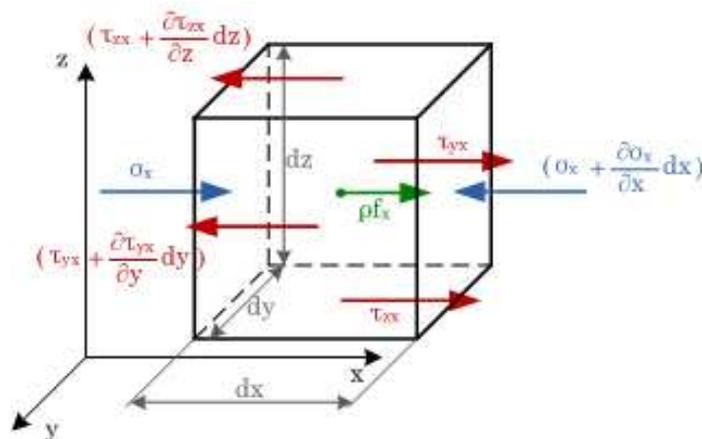


Fig 2.2

Per l'equazione di bilancio in direzione x si avrà allora (vedi Fig 2.2):

$$\sigma_x \cdot dydz - \left(\sigma_x + \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} dx \right) dydz + \tau_{yx} \cdot dx dz - \left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} dy \right) dx dz + \tau_{zx} \cdot dx dy - \left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} dz \right) dx dy + \rho f_x \cdot dx dy dz = \rho \frac{Du}{Dt} dx dy dz$$

$$-\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + \rho f_x = \rho \frac{Du}{Dt}$$

Esplicitando anche il bilancio nelle direzioni y e z si ottengono espressioni simili alla precedente con variazioni sugli indici delle forze. Si ottiene pertanto il seguente sistema di tre equazioni vettoriali:

$$\begin{cases} \rho f_x - \frac{\partial \sigma_x}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} = \rho \frac{Du}{Dt} \\ \rho f_y - \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} - \frac{\partial \sigma_y}{\partial y} - \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} = \rho \frac{Dv}{Dt} \\ \rho f_z - \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} - \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = \rho \frac{Dw}{Dt} \end{cases}$$

In tale sistema di equazioni sono riconoscibili a primo membro tutte le forze agenti sul volume di controllo. Si può pertanto concludere con le seguenti considerazioni:

- i termini ρf_x , ρf_y , ρf_z rappresentano le generiche forze di massa agenti nelle tre direzioni dello spazio
- Per l'equilibrio alla rotazione del volume di controllo si può dimostrare che vale:

$$\begin{cases} \tau_{xy} = \tau_{yx} \\ \tau_{xz} = \tau_{zx} \\ \tau_{yz} = \tau_{zy} \end{cases}$$

Tali indici sono pertanto intercambiabili in volumi di controllo non soggetti a rotazione

2.1.4 - Equazione del moto di Navier-Stokes per fluidi Newtoniani

Come è noto qualsiasi fluido non sopporta sforzi di tipo tangenziale ed in presenza di essi il fluido modifica il suo stato di quiete cambiando la sua forma. Trattando in seguito i fenomeni di combustione avremo a che fare con la classe di fluidi che prende il nome di "fluidi Newtoniani", fluidi nei quali si manifesta una proporzionalità diretta fra tensioni viscosse e deformazioni del fluido[5][6].

Prendendo in esame un volume di controllo contenente un fluido Newtoniano supponiamo di applicare sulla sua superficie superiore (ortogonale all'asse y) una tensione tangenziale diretta secondo la direzione x (vedi Fig.2.3)

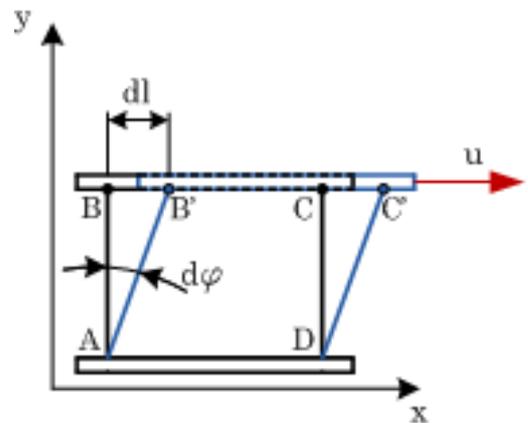


Fig 2.3

Esaminando lo spostamento $\overline{BB'}$ è possibile esprimerlo in funzione della velocità con le seguenti uguaglianze:

$$\overline{BB'} = dl \quad \rightarrow \quad dl = du \cdot dt$$

Vale inoltre che:

$$dl = d\varphi \cdot dy$$

Quindi segue che:

$$d\varphi \cdot dy = du \cdot dt \quad \rightarrow \quad \frac{d\varphi}{dt} = \frac{du}{dy}$$

Essendo le tensioni τ proporzionali alle deformazioni $d\varphi/dt$ varrà anche:

$$\tau_{yx} \propto \frac{du}{dy}$$

Per fluidi Newtoniani il coefficiente di proporzionalità prende il nome di “*coefficiente di viscosità dinamica*” e viene indicato con μ

$$\tau_{yx} \propto \frac{du}{dy} \quad \rightarrow \quad \tau_{yx} = \mu \cdot \frac{du}{dy} \quad \text{con} \quad \mu = \nu \cdot \rho$$

Ripetendo gli stessi ragionamenti nei piani spaziali yz e xz sullo stesso volume di fluido newtoniano si ottiene:

$$\tau_{yx} = \mu \cdot \frac{du}{dy} \quad \tau_{xy} = \mu \cdot \frac{dv}{dx} \quad \tau_{yz} = \mu \cdot \frac{dw}{dy} \quad \tau_{zy} = \mu \cdot \frac{dv}{dz} \quad \tau_{xz} = \mu \cdot \frac{dw}{dx} \quad \tau_{zx} = \mu \cdot \frac{du}{dz}$$

A cui si aggiungono le eventuali tensioni normali:

$$\tau_{xx} = 2\mu \cdot \frac{du}{dx} \quad \tau_{yy} = 2\mu \cdot \frac{dv}{dy} \quad \tau_{zz} = 2\mu \cdot \frac{dw}{dz}$$

Delle sei tensioni tangenziali, tre sono linearmente indipendenti; si è visto infatti alla pagina precedente che in assenza di rotazioni le tensioni aventi indice invertito corrispondono. Si possono dunque rappresentare i termini di tensione in forma più compatta:

$$\tau_{yx} = \tau_{xy} = \mu \cdot \left(\frac{du}{dy} + \frac{dv}{dx} \right) \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \cdot \left(\frac{dw}{dy} + \frac{dv}{dz} \right) \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \cdot \left(\frac{dw}{dx} + \frac{du}{dz} \right)$$

Nel caso di fluidi Newtoniani comprimibili reali, come nel caso dei reagenti utilizzati in combustione, le tensioni normali σ presentate in precedenza devono essere modificate prendendo in considerazione due costanti di proporzionalità: la viscosità dinamica μ e il cosiddetto “*secondo coefficiente di viscosità*” μ' .

Il primo relaziona le tensioni viscosive alle deformazioni lineari mentre μ' relaziona le tensioni viscosive alla deformazione volumetrica.

Tali tensioni inoltre, si oppongono alle pressioni normali che agiscono sul fluido e perciò data l'espressione della deformazione volumetrica:

$$\varepsilon_V = \frac{du}{dx} + \frac{dv}{dy} + \frac{dw}{dz} = \text{div}(\mathbf{u})$$

Si ottengono tre nuove espressioni delle tensioni normali per fluidi reali newtoniani:

$$\begin{cases} \sigma_x = p - \mu' \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) - 2\mu \cdot \frac{\partial u}{\partial x} \\ \sigma_y = p - \mu' \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) - 2\mu \cdot \frac{\partial v}{\partial y} \\ \sigma_z = p - \mu' \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) - 2\mu \cdot \frac{\partial w}{\partial z} \end{cases}$$

Queste saranno sostituite nelle equazioni di bilancio dei momenti di partenza:

$$\begin{cases} \rho f_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \mu' \cdot \text{div}(\mathbf{u}) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] = \rho \frac{Du}{Dt} \\ \rho f_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \mu' \cdot \text{div}(\mathbf{u}) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] = \rho \frac{Dv}{Dt} \\ \rho f_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \mu' \cdot \text{div}(\mathbf{u}) \right] = \rho \frac{Dw}{Dt} \end{cases}$$

Risolvendo, con passaggi matematici si ottengono le Equazioni del moto nelle tre direzioni dello spazio per fluidi Newtoniani reali.

Tale sistema di equazioni prende il nome di **Equazioni di Navier-Stokes**:

$$\begin{cases} \rho f_x - \frac{\partial p}{\partial x} + (\mu + \mu') \frac{\partial}{\partial x} \text{div}(\mathbf{u}) + \mu \cdot \nabla^2 u = \rho \frac{Du}{Dt} \\ \rho f_y - \frac{\partial p}{\partial y} + (\mu + \mu') \frac{\partial}{\partial y} \text{div}(\mathbf{u}) + \mu \cdot \nabla^2 v = \rho \frac{Dv}{Dt} \\ \rho f_z - \frac{\partial p}{\partial z} + (\mu + \mu') \frac{\partial}{\partial z} \text{div}(\mathbf{u}) + \mu \cdot \nabla^2 w = \rho \frac{Dw}{Dt} \end{cases}$$

Risolvendo infine la derivata sostanziale a secondo membro e riarrangiando gli ultimi due termini a primo membro si ottiene una espressione compatta delle tre equazioni direttamente utilizzata nei codici numerici di calcolo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \text{grad}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\text{grad}(p) + \text{grad}(\bar{\boldsymbol{\tau}}) + f$$

Nella quale $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ rappresenta il “*tensore degli sforzi*” ed f l'insieme di tutte le forze di massa esterne comprensive della gravità.

2.1.5 – Il tensore degli sforzi

Dal procedimento mostrato per ottenere le equazioni di bilancio si ha che tutte le forze tangenziali possono essere raccolte nel tensore degli sforzi $\bar{\tau}$ la cui espressione è data da:

$$\bar{\tau} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_{yy} & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Dove indicando con $i = \{1,2,3\}$ e $j = \{1,2,3\}$ rispettivamente le posizioni di riga e colonna nel tensore si ha che nelle posizioni $i = j$ compaiono le componenti normali dello sforzo (che nei fluidi è sempre di compressione) mentre per $i \neq j$ le componenti tangenziali.

Sostituendo nel tensore i valori assegnati alle varie σ e τ (indicate a pagina 13) e raccogliendo il termine comune μ si ottiene:

$$\bar{\tau} = \mu \cdot \begin{pmatrix} 2 \cdot \frac{du}{dx} & \left(\frac{du}{dy} + \frac{dv}{dx}\right) & \left(\frac{dw}{dx} + \frac{du}{dz}\right) \\ \left(\frac{du}{dy} + \frac{dv}{dx}\right) & 2 \cdot \frac{dv}{dy} & \left(\frac{dw}{dy} + \frac{dv}{dz}\right) \\ \left(\frac{dw}{dx} + \frac{du}{dz}\right) & \left(\frac{dw}{dy} + \frac{dv}{dz}\right) & 2 \cdot \frac{dw}{dz} \end{pmatrix}$$

E' possibile indicare ogni elemento del tensore in esame in una forma più compatta e comoda ponendo:

$$u_i \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix}, \quad u_j \begin{Bmatrix} u \\ v \\ w \end{Bmatrix} \quad ; \quad x_i \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix}, \quad x_j \begin{Bmatrix} x \\ y \\ z \end{Bmatrix} \quad \text{per } i = \{1,2,3\} \text{ e } j = \{1,2,3\}$$

Scrivendo ogni componente della matrice precedente come:

$$\tau_{ij} = \nu \cdot \rho \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\}$$

Ora, se la generica derivata $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$ è equivalente ai termini $\frac{\partial \varphi}{\partial t}$ relativi ad ogni direzione dello spazio ne avremo che ciascun elemento $\left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\}$ rappresenta una deformazione angolare. La matrice composta da tutti gli elementi di questo tipo prende il nome di “*tensore delle deformazioni*” (*strain tensor*) ed è indicato con \bar{S}

La relazione esistente fra i tensori di tensione e deformazione sarà utilizzata in seguito e si può scrivere come un prodotto tensoriale del tipo:

$$\bar{\tau} = \rho \nu \cdot \bar{S}$$

2.1.6 - Equazione dell'energia

I termini energetici che in generale devono essere considerati in campo ingegneristico, costituiscono una importante equazione descrittiva di sistemi energetici di tipo aperto e prendono in considerazione flussi energetici di calore o lavoro compiuti sul sistema o dal sistema attraverso il contorno dell'insieme fisico considerato oppure l'effetto di variazioni locali di energia interne al sistema stesso come una sorgente di calore o una variazione dell'energia interna imputabili a molteplici cause (reazione chimica, combustione, ...)

L'insieme di tutti i termini che descrivono gli aspetti energetici formano l'equazione dell'energia esprimibile, in generale, in quattro modi principali diversi a seconda che si utilizzi un riferimento alla temperatura, all'entalpia, all'energia totale o ad altre forme espressive comunque raffrontabili fra loro[1][2][7]. Verrà rappresentata una di queste forme:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla(\mathbf{u}(\rho E + P)) = \nabla \left(-(\lambda_c \cdot \nabla T) - \sum_j h_j \cdot \mathbf{J}_j + (\boldsymbol{\tau}_{ij} \mathbf{u}) \right) + S_h$$

dove:

- $\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla(\mathbf{u}(\rho E + P))$: Variazione locale e trasporto dell'energia totale comprensivo del lavoro compiuto sul o dal sistema tramite la pressione
- $-\nabla(\lambda_c \cdot \nabla T)$: Flusso diffusivo di calore attraverso il contorno del sistema
- $-\nabla(\sum_j h_j \cdot \mathbf{J}_j)$: Sorgente interna di energia (radiazione, accensione,...)
- $\nabla(\mathbf{u}\boldsymbol{\tau}_{ij})$: Variazione dell'energia totale imputabile forze dissipative
- S_h : Lavoro compiuto sul o dal sistema imputabile alle forze di massa

Nell'espressione indicata, E rappresenta l'energia totale per unità di massa.

2.1.7 – Equazioni mediate secondo Favre

Le equazioni di conservazione viste fino ad ora sono equazioni applicabili a fluidi comprimibili (e con le opportune semplificazioni anche a fluidi incomprimibili per i quali non si hanno significative variazioni di densità). Nel caso si debbano esprimere invece le equazioni di governo per sistemi in combustione o a temperature significativamente variabili, occorre tenere conto degli effetti che la temperatura ha sulle proprietà fisiche dei fluidi in gioco. In genere il fenomeno che per primo salta agli occhi, parlando di fluidi comprimibili in combustione, è la forte diminuzione di densità imputabile all'alta temperatura che è accompagnata da significativi aumenti della velocità del fluido nelle geometrie aventi sezioni di passaggio costante. Questo fenomeno fisico deve essere tenuto in considerazione modificando opportunamente le equazioni di governo ed il metodo più noto ed utilizzato è conosciuto come “*media secondo Favre*” (o “*Favre average*”)[9].

Secondo la teoria di Favre, nei sistemi caratterizzati da grandi variazioni di densità è opportuno introdurre una media pesata della generica componente u del vettore velocità \mathbf{u} sulla densità (density-weighted average), indicata con \tilde{u} . Tale media prende il nome di “media di Favre” e si ottiene scindendo la velocità nel seguente modo:

$$u(x, t) = \tilde{u}(x, t) + u''(x, t)$$

valida ovviamente anche per le altre componenti di velocità.

Per identificare in questa equazione i termini \tilde{u} ed u'' si procede introducendo una essenziale dipendenza dalla densità che è funzione della temperatura. Si richiede cioè l’annullamento della seguente media:

$$\overline{\rho \cdot u''} = 0$$

Questa espressione permette di svincolarsi dalla variazione delle fluttuazioni di velocità conservando solo il valore medio pesato di velocità. Per fare questo si ricava matematicamente la definizione di \tilde{u} partendo dall’esprimere la media di $\rho \cdot u$ nel seguente modo:

$$\overline{\rho u} = \overline{\rho \tilde{u}} + \overline{\rho u''} = \bar{\rho} \cdot \tilde{u}$$

da cui:

$$\tilde{u} = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}}$$

Il vantaggio della media di Favre non si vede sicuramente da questa espressione, per la quale risulta difficoltoso avere, nei casi pratici la media del prodotto ρu . Il largo utilizzo di questa teoria si comprende invece nelle ricadute che il suo utilizzo ha nella semplificazione delle equazioni di Navier-Stokes. In esse, i termini convettivi sono determinanti e dati dal prodotto di più componenti di velocità funzione della temperatura. Esaminando infatti il termine convettivo si comprende il vantaggio della scelta di usare la media di Favre:

$$\rho uv = \rho(\tilde{u} + u'')(\tilde{v} + v'') = \rho \tilde{u} \tilde{v} + \rho u'' \tilde{v} + \rho v'' \tilde{u} + \rho u'' v''$$

$$\overline{\rho uv} = \bar{\rho} \cdot \bar{u} \cdot \bar{v} + \bar{\rho} \cdot \overline{u' v'} + \overline{\rho' u'} \cdot \bar{v} + \overline{\rho' v'} \cdot \bar{u} + \overline{\rho' u' v'}$$

Le semplificazioni introdotte dalla media di Favre sono frequentemente utilizzate nella maggioranza degli studi di fenomeni caratterizzati dalla fluttuazione delle grandezze caratteristiche del sistema. Esse permette infatti un agevole approccio a molti problemi che resterebbero vincolati ad equazioni troppo complesse per una risoluzione diretta

2.2 Teoria della turbolenza

2.2.1 – Introduzione

In campo ingegneristico e soprattutto nel mondo industriale, la maggior parte delle problematiche legate al moto dei fluidi e ai problemi di combustione riguardano regimi di moto turbolento, ad eccezione dei pochi e confinati casi di combustione in piccole caldaie domestiche dove si ricerca una fiamma assolutamente laminare capace di evitare malfunzionamenti o complicazioni non giustificate nelle applicazioni civili di questo tipo. Il fatto che la maggioranza dei casi coinvolga lo studio di flussi e fiamme turbolenti rende lo studio della turbolenza una necessità non solo teorica, ma essenziale per giungere al controllo dei fenomeni fisici che li regolano. Occorre identificare quindi alcuni strumenti matematici capaci di aiutarci in questo studio.

Si introdurranno in questo capitolo i principi fisici della turbolenza e la sua modellazione CFD iniziando dalla descrizione delle principali caratteristiche di un flusso turbolento.

2.2.2 – La turbolenza

I concetti ed i principi che regolano i moti a regime turbolento traggono origine dalle osservazioni sperimentali di Reynolds che, incrementando la velocità di un fluido in quiete all'interno di un condotto a geometria nota, per primo si accorse del caratteristico moto caotico tridimensionale che veniva a crearsi nella corrente fluida. L'instabilità dei filetti fluidi è stata da Reynolds descritta proporzionalmente alla velocità del fluido stesso e funzione della geometria per mezzo del noto numero adimensionale sotto riportato:

$$Re = \frac{u \cdot L}{\nu}$$

Tale numero viene detto *Numero di Reynolds* ed in esso u ed L sono macroscale caratteristiche di velocità e di lunghezza (scale dimensionali) mentre ν rappresenta la viscosità cinematica del flusso. Per bassi valori del numero di Reynolds, tendenzialmente per $Re < 2000$, i flussi sono laminari, mentre si osserva che ai più alti valori di Re essi diventano turbolenti [5].

La natura dei flussi turbolenti è caratterizzata da un ampissimo numero di scale di lunghezza e di tempo. Infatti i grandi vortici aventi alto numero di Reynolds vanno spezzandosi in vortici più piccoli che a loro volta continuano a frazionarsi in vortici di dimensioni sempre minori. Questo processo di decomposizione in vortici sempre più piccoli continua fin quando le forze viscosive iniziano a dominare e prendere il sopravvento sulle forze convettive di trasporto e frazionamento dei vortici stessi. Quando interviene questo fenomeno, i più piccoli vortici ottenuti si estinguono dissipati dalle forze viscosive che trasformano la loro energia cinetica in calore.

Questa teoria di trasferimento energetico dai vortici più grandi verso vortici sempre più piccoli è conosciuta come CASCATA DELL'ENERGIA del moto turbolento e trae origine dalle teorie sviluppate da Richardson - Kolmogorov applicate alla turbolenza omogenea isotropica.

Occorre pertanto iniziare la trattazione dalla definizione di “*energia cinetica turbolenta*” mettendo in evidenza come la sua formulazione matematica sia direttamente connessa con le equazioni di bilancio dei momenti presentate nel primo capitolo. Da tale formulazione si trae la spiegazione

matematica dell'importanza delle forze viscosi nel processo di dissipazione e trasformazione dell'energia turbolenta in calore.

2.2.3 – L'energia cinetica e la sua dissipazione

Come è noto, il moto di un fluido può avvenire se ad esso è conferita energia. Questa energia può essere classificata secondo diverse forme ma negli studi fluidodinamici e di combustione le principali forme di energia con cui si può avere a che fare sono le tre sotto indicate, delle quali si riporta l'espressione specifica (riferita all'unità di massa) [11]

-Energia cinetica – Forma energetica che si manifesta nella velocità posseduta dalle particelle fluide. E' direttamente proporzionale alla massa di fluido considerato e funzione del quadrato della velocità media.

$$k = \frac{1}{2} \cdot v^2$$

-Energia potenziale – Forma energetica direttamente proporzionale alla quota geodetica z assunta dalle varie particelle fluide rispetto al livello di riferimento arbitrariamente fissato nel "livello del mare".

$$k = g \cdot z$$

-Energia entalpica – Energia conferita mediante somministrazione di calore al fluido, in genere direttamente proporzionale alla temperatura

$$h = c_p \cdot T$$

Di queste tre espressioni la forma cinetica è ampiamente prevalente alle altre quando si ha a che fare con problemi fluidodinamici generici privi di combustione e reazioni chimiche mentre la terza forma presentata diventa prevalente nei casi di combustione che saranno studiati successivamente.

Parlando di turbolenza si prenderà in considerazione l'espressione dell'Energia cinetica come unica forma non trascurabile riproponendone l'espressione precedente applicata ad un volume di controllo V :

$$k = \frac{1}{2} \int_V \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} dV \quad \rightarrow \quad k = \frac{1}{2} \rho \int_V |\mathbf{u}|^2 \cdot dV$$

Si è ora interessati a seguire l'evoluzione temporale dell'energia cinetica nel volume fluido e identificare l'effetto che i vari termini delle equazioni del moto hanno sull'energia stessa. La variazione temporale dell'energia cinetica si può esprimere come:

$$\frac{\partial k}{\partial t} = \frac{1}{2} \int_V \rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right] dV \quad \rightarrow \quad \frac{\partial k}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \int_V 2 \left(\mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) dV \quad \rightarrow \quad \frac{\partial k}{\partial t} = \rho \int_V \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dV$$

Considerando ora l'equazione di bilancio dei momenti riportata al termine del capitolo 1 si può notare che in assenza di combustione, considerando un fluido per semplicità incomprimibile la densità può essere ritenuta costante e la forma diventa del tipo:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \text{grad}(\mathbf{u}) = -\text{grad}(p) + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{f} \quad \rightarrow \quad \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{f}$$

Si moltiplicano ambo i termini per \mathbf{u} si ottiene:

$$\begin{aligned} \rho \mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u}\mathbf{u}) &= -\mathbf{u}\nabla p + \mu \mathbf{u}\nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{u}\mathbf{f} \quad \rightarrow \quad \rho \mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \\ &= -\rho \mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u}\mathbf{u}) - \mathbf{u}\nabla p + \mu \mathbf{u}\nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{u}\mathbf{f} \end{aligned}$$

da cui, eseguendo l'integrale sul volume di controllo del primo termine, si riconosce l'espressione della variazione temporale dell'energia cinetica:

$$\rho \int_V \mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dV = \int_V [-\rho \mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u}\mathbf{u}) - \mathbf{u}\nabla p + \mu \mathbf{u}\nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{u}\mathbf{f}] \cdot dV$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} = \int_V [-\rho \mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u}\mathbf{u}) - \mathbf{u}\nabla p + \mu \mathbf{u}\nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{u}\mathbf{f}] \cdot dV$$

Si possono ora elaborare i termini entro parentesi quadre tenendo conto che:

$$\mathbf{u} \cdot \nabla(\mathbf{u}\mathbf{u}) = \frac{1}{2} \nabla(\mathbf{u}|\mathbf{u}|^2) \quad , \quad \mathbf{u} \cdot \nabla p = \nabla(p\mathbf{u}) \quad , \quad \mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{u} = \nabla(\nabla\mathbf{u}\mathbf{u}) - |\nabla\mathbf{u}|^2$$

$$\frac{\partial k}{\partial t} = \int_V \left[-\frac{\rho}{2} \nabla(\mathbf{u}|\mathbf{u}|^2) - \nabla(p\mathbf{u}) + \mu \nabla(\nabla\mathbf{u}\mathbf{u}) - \mu |\nabla\mathbf{u}|^2 \right] \cdot dV + \int_V \rho \mathbf{u}\mathbf{f} \cdot dV$$

Si applica il teorema della divergenza:

$$\begin{aligned} \int_V \left[-\frac{\rho}{2} \nabla(\mathbf{u}|\mathbf{u}|^2) - \nabla(p\mathbf{u}) + \mu \nabla(\nabla\mathbf{u}\mathbf{u}) - \mu |\nabla\mathbf{u}|^2 \right] \cdot dV &= \\ &= \int_S \left[-\frac{\rho}{2} (\mathbf{u}|\mathbf{u}|^2) - (p\mathbf{u}) + \rho \cdot v(\nabla\mathbf{u}\mathbf{u}) \right] \mathbf{n} \cdot dS - \int_V \rho \cdot v |\nabla\mathbf{u}|^2 dV + \int_V \rho \mathbf{u}\mathbf{f} \cdot dV \end{aligned}$$

Dal quale risulta nullo l'integrale di superficie (le normali a superfici contrapposte si annullano). Ciò che rimane è la cercata espressione della variazione temporale dell'energia cinetica:

$$\frac{\partial k}{\partial t} = - \int_V \rho \cdot v |\nabla\mathbf{u}|^2 dV + \int_V \rho \mathbf{u}\mathbf{f} \cdot dV$$

dove il quadrato del termine $\nabla\mathbf{u}$ rappresenta la “velocità di dissipazione dell'energia cinetica per unità di massa” e cioè il termine di dissipazione ϵ .

$$\epsilon = v \cdot |\nabla\mathbf{u}|^2$$

Si ottiene la forma finale dell'espressione:

$$\frac{\partial k}{\partial t} = \int_V \rho \mathbf{u} \mathbf{f} \cdot dV - \int_V \rho \epsilon dV$$

In conclusione, partendo dalle equazioni di Navier-Stokes si è giunti ad una espressione della variazione dell'energia cinetica turbolenta. Essa risulta funzione di soli due termini:

- Un termine derivante dalle forze di volume

Tale termine indica l'energia cinetica turbolenta introdotta nel sistema in esame dalle generiche forze di volume alle scale del moto più grandi

- Un termine viscoso

Da questo secondo termine si comprende pienamente che l'energia cinetica viene trasportata nei vortici a lunghezza caratteristica via via decrescente fino ad essere dissipata dalla viscosità. Si ha infatti che per definizione, ϵ è sempre positivo e perciò l'integrale in cui compare sarà sempre un numero negativo che dissiperà inesorabilmente l'energia k alle piccole scale del moto. Considerando al limite un flusso stazionario si avrebbe infatti:

$$\frac{\partial k}{\partial t} = 0 \quad \rightarrow \quad \int_V \rho \mathbf{u} \mathbf{f} \cdot dV = \int_V \rho \epsilon dV$$

Dove si comprende come tutta l'energia introdotta verrebbe completamente dissipata ad uguale velocità dalla viscosità fino al raggiungimento di uno stato di equilibrio fra introduzione di k e dissipazione di k .

Da queste considerazioni si può infine notare che i termini non lineari delle equazioni di Navier-Stokes, ovvero i termini di pressione ed i termini convettivi) non contribuiscono in alcun modo alla dissipazione dell'energia cinetica. In effetti questo non avrebbe senso in quanto in un qualunque sistema le variazioni di pressione e lo spostamento convettivo di massa comportano solo un trasferimento di energia e non un cambiamento nel valore di k .

Questo permette di giungere ad un risultato fisicamente molto importante che assegna ai vari termini delle equazioni del moto specifiche " mansioni" nei confronti della distribuzione di energia in un flusso turbolento. Si possono dividere cioè:

- I termini viscosi

Sono i termini dissipativi che intervengono nel dissipare energia cinetica localmente a ben specifiche grandezze caratteristiche dei vortici che trasportano l'energia k . La dissipazione è cioè un fenomeno che avviene localmente in vortici di dimensioni indipendenti dai vortici di dimensione diversa. L'efficacia con cui viene dissipata l'energia cresce con il reciproco del quadrato della lunghezza caratteristica del vortice

$$\epsilon \propto \frac{1}{L^2}$$

- I termini non lineari

Sono invece i termini responsabili del trasferimento di energia fra vortici di dimensione diversa senza in alcun modo poterne causare la dissipazione o l'incremento.

Da queste considerazioni nasce l'idea della CASCATA DELL'ENERGIA dapprima ipotizzata da Richardson e matematicamente risolta, in particolari condizioni, da Kolmogorov. Si scenderà ora in un maggior dettaglio di tale teoria.

2.2.4 – Turbolenza omogenea ed isotropa – La cascata dell'energia

L'idea che sta alla base del meccanismo di trasferimento dell'energia cinetica viene inizialmente ipotizzata da Richardson nel 1922. Egli riuscì a spiegare qualitativamente il problema immaginando la seguente situazione: l'energia entra nel flusso alle scale del moto più grandi e, attraverso meccanismi di instabilità, vengono a prodursi vortici più piccoli che a loro volta generano vortici ancora più piccoli e così via fino a quando le dimensioni non sono talmente piccole che la viscosità dissipa le strutture impedendo ogni ulteriore trasferimento. Il trasferimento di cui parla Richardson è perciò un trasferimento “a cascata” essenzialmente non viscosa, dove l'energia viene integralmente ceduta dalle scale vorticosi di lunghezza più grandi fino alle più piccole senza accumuli intermedi fino alla sua totale dissipazione in calore [11].

Sotto condizioni così generali non è però possibile quantificare questi fenomeni e conoscere, ad esempio, le dimensioni delle scale di lunghezza più piccole, a quale scala può intervenire la dissipazione e la sua entità. Occorre per questo stabilire alcune ipotesi iniziali che pongano il problema in condizioni più “agevoli” alla sua quantificazione. Questo compito venne brillantemente risolto da Kolmogorov nel 1941 [10] con la pubblicazione di una teoria sul trasferimento energetico di flussi turbolenti applicabile alla turbolenza omogenea ed isotropa.

Occorre anzitutto precisare che la turbolenza isotropa ed omogenea è un concetto astratto che non può verificarsi in modo esatto in nessun sistema fisico reale. L'imposizione di queste ipotesi è però necessaria per due motivi in quanto:

- Semplifica enormemente la trattazione teorica permettendo di cogliere il senso fisico della teoria
- E' giustificata dal fatto che tutti i sistemi fisici reali soddisfano almeno localmente queste ipotesi

Quindi l'asserzione di partenza che sta alla base della teoria di Kolmogorov si può formulare nel seguente modo:

“ Per numeri di Reynolds sufficientemente elevati le strutture fluidodinamiche piccole in un flusso turbolento sono statisticamente isotrope”

- In tale definizione è molto importante verificare che il sistema sia caratterizzato da un numero di Reynolds elevato delle grandi scale del moto. Solo in presenza di un numero di

Reynolds sufficientemente elevato infatti possono esistere le citate strutture fluidodinamiche piccole. Infatti se si ipotizza che ad ogni passo della cascata energetica le strutture perdano sempre più memoria delle caratteristiche dei vortici che hanno innescato la cascata allora si avrà che per alto numero di Reynolds dei grandi vortici la cascata energetica sarà molto lunga e le strutture fluidodinamiche più piccole acquisteranno, in qualunque sistema in esame, le stesse caratteristiche, avendo dimenticato le strutture inerziali di partenza. In definitiva le strutture piccole potranno, sotto queste condizioni, acquistare la caratteristica “*universale*” di isotropia statistica.

- Da quanto detto si evince che la cascata dell’energia può avvenire fino a che il fenomeno di dissipazione non diventa preponderante interrompendo il trasferimento. E’ da precisare che le grandi scale del moto non sono identicamente prive di dissipazione ma possono essere considerate essenzialmente non viscosi per il fatto che, prima che i termini viscosi possano agire sulle grandi strutture instabili, esse si frazionano in strutture più piccole. Pertanto è solo grazie alla elevata instabilità delle strutture vorticosi maggiori che la dissipazione diventa efficace alle più piccole scale di lunghezza, laddove cioè i vortici sono stabili e i fenomeni viscosi hanno il tempo per dissipare energia cinetica.

Un secondo importante quesito che trova risposta nella teoria di Kolmogorov consiste nella necessità di conoscere quanta energia viene trasferita dai grandi vortici verso quelli più piccoli. A questa domanda risponde la seconda ipotesi di Kolmogorov:

“Per numeri di Reynolds sufficientemente elevati, le caratteristiche delle piccole scale di tutti i flussi turbolenti sono universali e sono determinate dalla viscosità ν e dalla potenza dissipata ϵ ”

- La caratteristica di universalità delle piccole scale è già stata illustrata poco sopra assieme alla necessità di numeri di Reynolds elevati. Una informazione nuova è invece il fatto che per tutti i flussi turbolenti, le caratteristiche delle piccole scale siano determinate dalla viscosità ν e da ϵ .

Si può spiegare questo fatto considerando un sistema fluido qualsivoglia, ad esempio una camera di combustione nella quale sia introdotta energia cinetica per mezzo dell’introduzione di combustibile e comburente a determinati valori di velocità. Si può notare che se il sistema è stazionario (come lo è sempre una camera di combustione come quelle in esame in questa tesi) l’ingresso dei reagenti è sempre costante e quindi lo è anche l’apporto di energia cinetica. In tali condizioni vale quanto visto nel capitolo precedente, ovvero:

$$\frac{\partial k}{\partial t} = 0 \quad \rightarrow \quad \int_V \rho \mathbf{u} \mathbf{f} \cdot dV = \int_V \rho \epsilon dV$$

Perciò, essendo la cascata dell’energia non viscosa, se ne deduce che l’energia cinetica turbolenta introdotta nell’unità di tempo deve coincidere con l’energia dissipata nell’unità di tempo, ϵ .

L’energia nell’unità di tempo è dimensionalmente una potenza perciò si avrà che la potenza trasferita dalle grandi scale del moto (dove la potenza entra nel sistema) fino alle più piccole scale (dove la potenza è dissipata) è *costante*.

- La dipendenza dalla viscosità, a cui si fa riferimento nella seconda ipotesi di Kolmogorov, ha invece un significato diverso che è già stato accennato. Siccome l'energia viene trasportata, grazie all'instabilità dei grandi vortici, fino alle piccole scale di lunghezza, il termine di viscosità è l'elemento chiave per determinare a quale dimensione caratteristica dei vortici la dissipazione prenderà il sopravvento sui fenomeni di instabilità. E' stato dimostrato, anche sperimentalmente, che fluidi aventi bassi valori di viscosità tendono a dissipare potenza in vortici di dimensioni maggiori rispetto ai casi in cui la viscosità è più alta. Infatti, laddove la viscosità ν ha valori più bassi la dissipazione ha una efficacia minore e non potendosi avere accumuli di energia cinetica turbolenta si ha che il fenomeno di dissipazione ha inizio prima, in vortici sufficientemente grandi portatori di maggiore energia, tali per cui ci sia il tempo necessario alla dissipazione viscosa. Nei sistemi dove invece la viscosità assume valori più elevati, essa risulta più efficace e la dissipazione può avvenire in vortici più piccoli prolungando quindi il meccanismo di trasferimento per instabilità dell'energia.
- Alla luce di queste precisazioni si potrebbe quantificare numericamente la potenza trasferita nel meccanismo a cascata calcolando l'energia introdotta nel sistema nell'unità di tempo ma sembrerebbe comunque ancora difficile esprimere numericamente le dimensioni delle strutture vorticosi più piccole e i tempi necessari alla dissipazione dell'energia cinetica. In realtà, osservando le espressioni dimensionali di ν e ϵ si nota che esiste un solo modo per esprimere la lunghezza caratteristica dei vortici in cui ha inizio il meccanismo di dissipazione viscosa. Definiamo pertanto dimensionalmente:

$L = \text{Lunghezza}$ $T = \text{Tempo}$ $E = \text{Energia specifica}$

$\nu = \text{Viscosità cinematica}$ $\left[\frac{L^2}{T} \right]$

$\epsilon = \text{Potenza dissipata nell'unità di tempo}$ $\left[\frac{E}{T} \right] = \left[\frac{L^2}{T^2} \cdot \frac{1}{T} \right] = \left[\frac{L^2}{T^3} \right]$

Componendo le due ultime grandezze vogliamo ottenere la scala di lunghezza η dei vortici nei quali si ha dissipazione dell'energia cinetica. Tale scala caratteristica prende il nome di "Scala caratteristica di Kolmogorov" [9]. L'unica composizione possibile è la seguente:

$$\eta = \sqrt[4]{\left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)} = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4}$$

Infatti risolvendone l'analisi dimensionale si ha:

$$\eta [L] = \left[\frac{\left(\frac{L^2}{T}\right)^3}{\left(\frac{L^2}{T^3}\right)} \right] = \left[\sqrt[4]{\frac{L^6}{L^2}} \right] = \left[\sqrt[4]{L^4} \right] = [L]$$

Allo stesso modo si possono univocamente costruire le scale di velocità e di tempo dei fenomeni dissipativi chiamate rispettivamente u_η e t_η che assumeranno la seguente forma:

$$u_\eta = (v \cdot \epsilon)^{1/4}$$

$$t_\eta = \left(\frac{v}{\epsilon}\right)^{1/2}$$

Si può pertanto concludere che la seconda ipotesi di Kolmogorov contiene le informazioni che permettono di definire quantitativamente, in funzione di v ed ϵ , la lunghezza, la velocità ed il tempo caratteristici delle scale dissipative, le più piccole presenti nella teoria della cascata dell'energia.

- Ricordando quanto affermato al primo punto relativo della seconda ipotesi di Kolmogorov si ha che in un processo stazionario, ϵ (potenza dissipata) coincide con la potenza immessa nel flusso alle scale del moto più grandi. Anche le scale più grandi possono essere definite da una lunghezza caratteristica e da una velocità e un tempo caratteristici. Perciò, dalla conservazione della potenza nel trasferimento a cascata sarà presumibilmente possibile esprimere la potenza dissipata utilizzando le grandezze caratteristiche dei vortici di più grande scala:

Se indichiamo con:

$$u_\ell = \text{Velocità caratteristica di grande scala} \quad \left[\frac{L}{T}\right]$$

$$\ell = \text{Lunghezza caratteristica di grande scala} \quad [L]$$

$$\epsilon = \text{Potenza dissipata nell'unità di tempo} \quad \left[\frac{E}{T}\right] = \left[\frac{L^2}{T^2} \cdot \frac{1}{T}\right] = \left[\frac{L^2}{T^3}\right]$$

è possibile esprimere ϵ in funzione di U e di L nel seguente modo:

$$\epsilon = \frac{u_\ell^3}{\ell}$$

Infatti risolvendone l'analisi dimensionale si ha:

$$\epsilon \left[\frac{L^2}{T^3}\right] = \left[\frac{\left(\frac{L}{T}\right)^3}{L}\right] = \left[\frac{L^2}{T^3}\right]$$

Si consideri che nel cercare di ricavare una possibile espressione della potenza dissipata utilizzando le grandezze caratteristiche delle grandi scale del moto, non si vuole utilizzare la viscosità cinematica ν (parametro necessario invece nella definizione delle scale di Kolmogorov) proprio perché i grandi vortici, come visto, risultano essere essenzialmente

non viscosi e caratterizzati da una elevata instabilità; fenomeni cioè governati da grandezze inerziali per i quali la viscosità è trascurabile.

Con l'introduzione delle grandezze caratteristiche dei vortici di grande scala è utile caratterizzare, oltre alla lunghezza caratteristica ℓ già introdotta, anche un tempo caratteristico t_ℓ e una velocità caratteristica u_ℓ .

Per tali vortici, ℓ è una grandezza nota in quanto è comparabile alle dimensioni delle scale inerziali di lunghezza del flusso determinate dalla geometria in esame. Esse sono genericamente misurabili dopo un primo esame della geometria stessa. Anche la velocità caratteristica dei grandi vortici è solitamente misurabile conoscendo le portate in gioco e le superfici medie di passaggio. Se ne ricava quindi anche il tempo caratteristico:

$$t_\ell = \frac{\ell}{u_\ell}$$

- Una relazione molto utile è il legame che esiste fra velocità caratteristica di grande scala u_ℓ ed energia cinetica turbolenta. La velocità caratteristica di un vortice rappresenta la velocità che il flusso deve avere per percorrere la lunghezza ℓ nel tempo t_ℓ ed è anche chiamata *turnover time*. Nel caso di turbolenza omogenea ed isotropa, velocità ed energia cinetica possono essere correlate considerando che u_ℓ è dello stesso ordine di grandezza della fluttuazione di velocità (che in un fluido isotropo è la stessa in ciascuna direzione spaziale). Dell'energia cinetica, invece, è già stata data la seguente definizione generale:

$$k = \frac{1}{2} \cdot u^2$$

dove u è il modulo di un vettore velocità nello spazio tridimensionale che può essere scomposto nel seguente modo:

$$k = \frac{1}{2} \cdot (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2}) \quad \rightarrow \quad k = \frac{1}{2} \overline{u' \cdot u'} + \frac{1}{2} \overline{v' \cdot v'} + \frac{1}{2} \overline{w' \cdot w'}$$

La semplificazione alla base della teoria di Kolmogorov è, come ricordato più volte, quella di considerare un sistema isotropo, dove quindi non c'è differenza fra le componenti u , v e w della velocità, essendo essa ugualmente indistinguibile in qualunque direzione. Se ne ha che l'equazione potrebbe essere riscritta come:

$$k = \frac{1}{2} \cdot (\overline{u'^2} + \overline{u'^2} + \overline{u'^2}) \quad \rightarrow \quad k = \frac{1}{2} \cdot 3(\overline{u'^2})$$

Ricavando il valore di u' si ottiene:

$$\overline{u'^2} = \frac{2}{3} \cdot k \quad \rightarrow \quad u' = \sqrt{\frac{2}{3} k}$$

Si può verificare sperimentalmente che questa fluttuazione di velocità, nel caso di turbolenza isotropa, è dello stesso ordine di grandezza della velocità caratteristica dei vortici di grande scala.

Esiste anche una importante proporzionalità fra k ed ϵ . Considerando l'espressione di u' trovata e se vale:

$$\epsilon = \frac{u_\ell^3}{\ell} \quad \rightarrow \quad u_\ell \propto u' = (\ell \cdot \epsilon)^{1/3}$$

si ha che:

$$\left(\frac{2}{3}k\right)^{1/2} = (\ell \cdot \epsilon)^{1/3} \quad \rightarrow \quad \ell = \frac{1}{\epsilon} \cdot \left(\frac{2}{3}k\right)^{3/2} \quad \rightarrow \quad \ell \propto \frac{k^{3/2}}{\epsilon}$$

dove la costante di proporzionalità è circa pari all'unità.

Con le considerazioni fatte sono state definite le grandezze caratteristiche dei vortici più piccoli (appartenenti alla scala di Kolmogorov) e dei vortici più grandi (vortici di grande scala). Resta pertanto da definire ciò che avviene alle scale di lunghezza intermedie e a questo proposito si può citare la terza ipotesi di Kolmogorov:

“Per numeri di Reynolds sufficientemente elevati, le caratteristiche statistiche delle strutture di dimensione r (con $\ell \gg r \gg \eta$) sono universali e dipendono unicamente da ϵ “

- Trattando le scale di lunghezza intermedie ad ℓ ed η viene anzitutto descritta la loro universalità, ovvero anche per esse il fatto che qualunque sia la geometria o il flusso di partenza sono i vortici più grandi ad assorbire le caratteristiche inerziali rendendo il comportamento delle strutture fluidodinamiche di dimensione r statisticamente identiche.
- In queste scale di lunghezza i vortici si frazionano diventando sempre più piccoli secondo un meccanismo pressoché identico per qualunque geometria in esame. I vortici infatti riducono la loro dimensione acquistando una sempre maggiore stabilità dinamica. Al ridursi della dimensione caratteristica r il tempo caratteristico dei vortici diminuisce fino a raggiungere i minimi valori nell'intervallo di dissipazione.
- Tutte le scale di lunghezza comprese fra l'intervallo dei vortici di grande scala e l'intervallo di dissipazione appartengono al cosiddetto “*sottointervallo inerziale*”. In esso le lunghezze caratteristiche dei vortici vengono indicate con r .

L'immagine sotto riportata mostra i tre intervalli analizzati mettendo in evidenza il processo di trasporto dell'energia cinetica turbolenta. Essa viene introdotta dal moto medio alle grandi scale

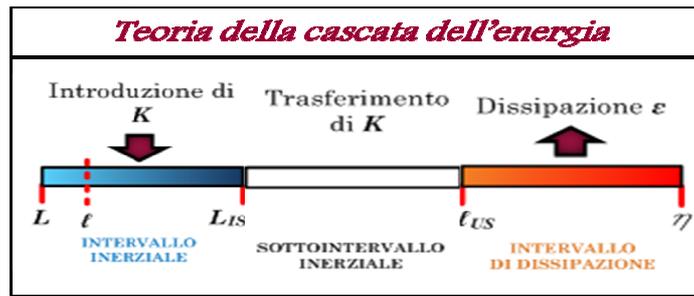


Fig 2.4

di lunghezza per essere trasportata dalla cascata energetica fino alle piccole scale del moto dove ne avviene la dissipazione.

2.2.5 – Distribuzione spettrale della turbolenza

L'utilizzo delle scale di lunghezza per l'identificazione della dimensione dei vortici è di efficace comprensione fisica ma non risulta matematicamente vantaggioso nella rappresentazione dell'energia cinetica contenuta nei vortici di diversa scala. E' invece più efficiente la rappresentazione della scala dei vortici nel "dominio dei numeri d'onda" introducendo le grandezze seguenti:

Lunghezza d'onda: λ

Considerando la periodicità spaziale di un'onda, la lunghezza d'onda rappresenta la distanza che intercorre tra due suoi massimi o minimi consecutivi. Questa definizione non è direttamente rappresentativa di una scala di lunghezza ma è un elemento necessario nella successiva definizione di numero d'onda.

Numero d'onda: k

Dimensionalmente il numero d'onda è l'inverso della lunghezza d'onda e coincide matematicamente con il concetto di frequenza. Il numero d'onda rappresenta la ripetitività temporale di un'onda nel periodo e può essere rappresentato con la seguente relazione:

$$k = \frac{2 \cdot \pi}{\lambda}$$

I vortici di più grande scala corrispondono alle maggiori lunghezze d'onda λ e di conseguenza saranno rappresentati da numeri d'onda di piccola entità. Al contrario per i più piccoli vortici che saranno caratterizzati dai maggiori numeri d'onda. La trasformazione dalle scale di lunghezza ai numeri d'onda può essere schematicamente rappresentata nel seguente modo:

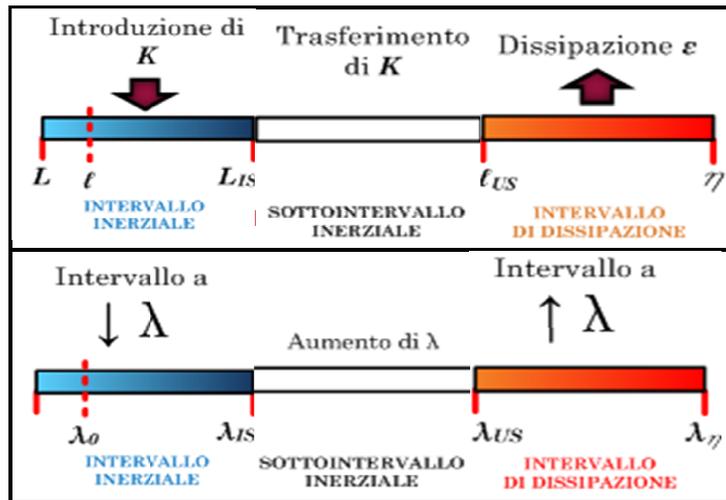


Fig 2.5

Come è stato detto, le strutture turbolente sono presenti a tutte le scale del moto comprese fra ℓ ed η ma l'energia cinetica turbolenta è diversamente ripartita in esse. Vortici di diversa dimensione possono contenere e trasportare diverse quantità di energia e pertanto si osserva una specifica distribuzione spettrale di energia cinetica turbolenta variabile ad ogni istante di tempo.

La rappresentazione in funzione del numero d'onda permette di identificare la distribuzione di K in tutti i vortici di diversa dimensione distinti per numero d'onda crescente.

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \rightarrow k_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0} < \dots < k_i = \frac{2\pi}{\lambda_i} < \dots < k_\eta = \frac{2\pi}{\lambda_\eta}$$

$$\forall k \in [k_0, \dots, k_i, \dots, k_\eta] \rightarrow E(k_i) = \text{Energia cinetica contenuta nel vortice } i\text{-esimo}$$

Il contributo energetico contenuto in tutti i vortici a diverso numero d'onda fornirà l'energia cinetica turbolenta totale trasportata nella cascata energetica:

$$K = \int_0^\infty E(k) \cdot dk$$

Per la rappresentazione dello spettro si può considerare la distribuzione del modulo di velocità del flusso in una direzione che possa essere identificata come direzione prevalente della corrente fluida. In essa lo spettro è identificato per mezzo dell'integrale di Fourier sopra riportato che presenta il valore della densità spettrale per ogni numero d'onda caratteristico della cascata energetica.

Il calcolo di $E(k)$ rappresenta la parte più delicata in quanto è realizzato per mezzo di un campionamento di una funzione continua quale può essere la distribuzione del modulo di velocità. Pertanto essa deve rispettare le leggi di buon campionamento, come il teorema di Nyquist-Shannon. Il procedimento utilizzato per il calcolo di $E(k)$ sarà presentato nel paragrafo successivo.

Per flussi ad alto numero di Reynolds, la teoria di Kolmogorov dimostra che la distribuzione spettrale assume un andamento caratteristico visibile nello studio turbolento applicato a una qualsiasi geometria. La legge che governa la curva spettrale è nota come legge $k^{-5/3}$ di Kolmogorov che mostra come il carattere universale dei vortici di piccola scala comporti una

distribuzione dell'energia cinetica simile in qualunque flusso a numeri d'onda sufficientemente alti [9].

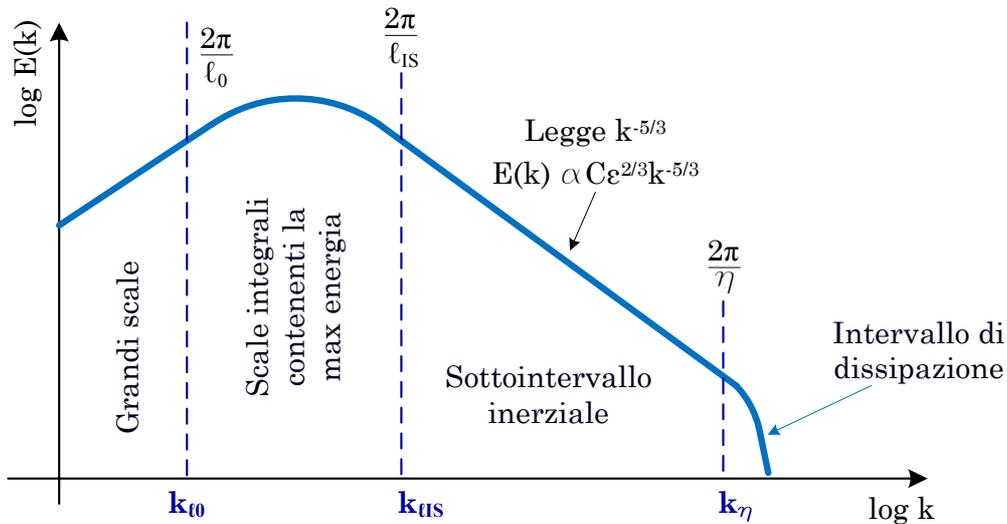


Fig 2.6

In particolare si nota che al diminuire della dimensione dei vortici (ovvero al crescere del numero d'onda) l'energia cinetica in essi contenuta diminuisca progressivamente con una legge di proporzionalità del tipo:

$$E(k) \propto C \cdot \varepsilon^{-2/3} \cdot k^{-5/3}$$

Questa diminuzione dell'energia spettrale per numero d'onda crescente si arresta giungendo nell'intervallo dei vortici di Kolmogorov. Qui lo spettro subisce un brusco taglio dovuto alla dissipazione per attrito dell'energia cinetica turbolenta. Dalla parte opposta del grafico si nota che i più grandi vortici inerziali contengono la maggior parte dell'energia cinetica turbolenta conferita loro dal moto medio. Essi, a causa dell'elevata instabilità cederanno questa energia ai vortici di dimensione via via minore innescando il trasferimento a cascata precedentemente introdotto.

3 TECNICHE CFD DI MODELLAZIONE DELLA TURBOLENZA

3.1 Caratteristiche dell'analisi CFD

Con l'acronimo CFD si usa indicare l'analisi, eseguita per mezzo di specifiche simulazioni al calcolatore, di sistemi aventi ad oggetto il comportamento fisico di fluidi, trasferimenti di calore e tutti i fenomeni ad essi associati comprensivi di eventuali reazioni chimiche.

Con tali tecniche, appoggiandosi al potente sviluppo dell'informatica e delle macchine di simulazione degli ultimi decenni, si riescono ad ottenere sorprendenti risultati nel campo della simulazione ed analisi del comportamento dei fluidi. Il perché del forte sviluppo delle tecniche di simulazione risiede principalmente nella necessità, sentita già diversi anni addietro, di prevedere il comportamento fluido laddove il solo approccio sperimentale risulta impraticabile.

Tralasciando infatti alcuni casi che potrebbero essere definiti "didattici", nei quali la sperimentazione e lo studio matematico classico sono sufficienti a completare le analisi di comprensione del problema, ci si accorge che il comportamento aleatorio dei fenomeni fluidi e le innumerevoli variabili che vi prendono parte limitano l'ottenimento di risultati sperimentali capaci di comprendere la fisica dettagliata del problema. In questi casi risulta allora necessario avere strumenti di simulazione che sono stati studiati e sviluppati nel corso degli anni con profitto, avendo ora la possibilità di utilizzarli nei più svariati campi delle scienze [5]:

- Idrodinamica
- Aerodinamica di velivoli e veicoli
- Fenomeni di combustione (Principalmente motori a combustione interna e turbine a gas)
- Ingegneria elettrica ed elettronica (Principalmente raffreddamento dei circuiti elettrici)
- Ingegneria dei processi chimici
- Studio delle turbomacchine
- Oceanografia e Idrologia
- Meteorologia e previsione del tempo atmosferico
- Ingegneria marina

E' comunque importante indicare che il principale problema che ad oggi si può riscontrare sugli approcci CFD è quello di essere, sempre e comunque, una approssimazione della realtà fisica in studio. In tal senso ogni simulazione è affetta da errori dovuti all'assunzione di modelli semplificativi della realtà che vengono implementati tramite il calcolatore e inoltre dalla presenza di errori numerici dovuti alla necessità di discretizzare il dominio fluido studiato, che pertanto non potrà raggiungere la perfezione sul risultato che lo studio di un sistema continuo potrebbe dare. L'utilizzo degli approcci CFD allo studio dei problemi fisici va pertanto attentamente valutato: occorre analizzare l'esistenza di modelli matematici capaci di rappresentare efficacemente il problema approcciato, studiare la migliore discretizzazione del sistema fluido in esame e analizzare criticamente i risultati ottenuti conoscendo adeguatamente le possibilità di errore della simulazione. Ecco perché ancora oggi, la maggioranza dei problemi necessita di appoggiarsi ad alcuni risultati sperimentali di confronto che assicurino ed indirizzino la simulazione e che sono necessari al miglioramento dei modelli matematici implementati.

3.2 Modellazione della turbolenza: Tecnica RANS

3.2.1 – Introduzione

Nelle grande maggioranza delle applicazioni ingegneristiche, l'attenzione è sempre rivolta ai valori medi delle grandezze in gioco, come la velocità media di consumo del combustibile o il tasso medio di formazione delle sostanze inquinanti che sono quasi sempre sufficientemente accurate per dare una descrizione fruibile del sistema o della grandezza in esame. E' infatti noto che studi più specialistici applicati al campo della fluidodinamica o della combustione richiedono tempi di calcolo molto gravosi economicamente ed in termini di tempo che solo in alcuni casi portano a soluzioni significativamente migliori rispetto a quelle che già una analisi media fornisce. Nei casi in cui, quindi, sia sufficiente considerare la soluzione media di un problema fluidodinamico le equazioni di conservazione che descrivono il sistema vengono mediate sulla base di una descrizione statistica del flusso turbolento.

La turbolenza costituisce un fenomeno irregolare, transitorio e tridimensionale, caratterizzato da fluttuazioni di tutte le proprietà locali del sistema e se questo può risultare intuitivamente percepibile verrà analizzato con maggior dettaglio nel successivo paragrafo dedicato alla turbolenza.

3.2.2 – Descrizione dell'approccio RANS

Le caratteristiche fluttuazioni di una qualsivoglia grandezza turbolenta (velocità, pressione, ...) rendono la rappresentazione di tali grandezze problematica perché costantemente variabile e causata da una tipica caoticità intrinseca. Pertanto, un semplice modo di vedere una grandezza aleatoriamente variabile può essere quello di suddividere qualsiasi quantità f in una componente media \bar{f} una fluttuante f' secondo la seguente espressione [5][12]:

$$f = \bar{f} + f'$$

in cui valga che:

$$\bar{f}' = 0$$

In luogo della generica grandezza f è possibile sostituire una tipica grandezza fluttuante come la componente i della velocità del fluido, ottenendo:

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \bar{u}_i(\mathbf{x}, t) + u_i'(\mathbf{x}, t)$$

in cui:

$$\bar{u}_i'(\mathbf{x}, t) = 0$$

Il valore medio della velocità (nell'esempio considerato) è definito diversamente per flussi globalmente stazionari o non stazionari come rappresentato nella successiva figura 3.1.

Se il flusso è stazionario rispetto alla media, è possibile definire una media temporale come:

$$\bar{u}_i = \lim_{\Delta T \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} u_i(\mathbf{x}, t) \cdot dt \right)$$

Per flussi transitori, $\bar{u}_i(\mathbf{x}, t)$ si calcola una media d'insieme, del tipo:

$$\bar{u}_i(\mathbf{x}) = \lim_{\Delta T \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^n \frac{u_{i,k}(\mathbf{x}, t)}{n} \right)$$

Dove $u_{i,k}(\mathbf{x}, t)$ rappresentano valori di velocità locale, misurati nel punto e all'istante voluti, ripetendo l'esperimento n volte e nelle stesse condizioni iniziali.

La definizione vista inizialmente al paragrafo, nota come decomposizione di Reynolds, può essere applicata alle equazioni istantanee di Navier-Stokes costruendo le cosiddette *Equazioni di Navier-Stokes mediate secondo Reynolds* (RANS Equations)

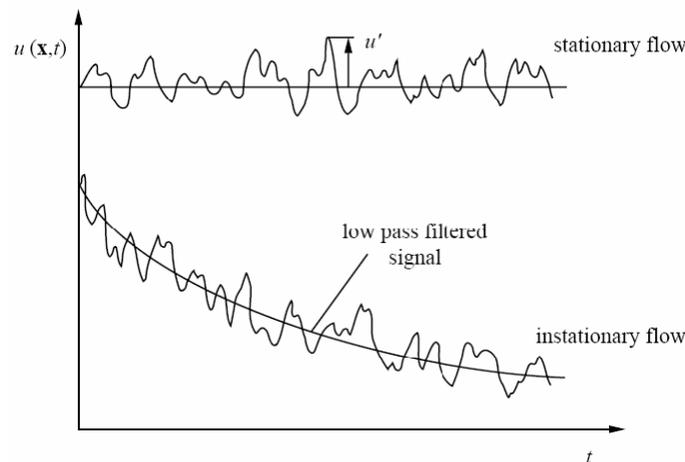


Fig 3.1

Mediando e sostituendo la relazione di decomposizione su tutte le equazioni di bilancio presentate nei capitoli precedenti, si ottengono equazioni di semplice risoluzione nella quale vengono completamente eliminate tutte le fluttuazioni mantenendo le sole componenti medie. L'espressione delle equazioni rimane lo stesso ma il significato delle grandezze contenute all'interno è marcatamente diverso e molto più semplice.

3.3 Modellazione della turbolenza: Tecnica LES

3.3.1 – Introduzione

Dalla teoria di Kolmogorov si è visto che i vortici del flusso di più grande scala sono fortemente dipendenti dalla geometria del dominio fluido che si prende in esame mentre quelli alle più piccole scale di lunghezza sono “universali”.

Da questa caratteristica, costante in qualsiasi problema fluidodinamico, discende l'idea che sta alla base dei modelli LES. In essi si parte dal presupposto di calcolare esplicitamente i vortici di più

grande scala e parte dei vortici di dimensione compresa nel sottointervallo inerziale tenendo comunque implicitamente conto dei vortici di piccola scala con l'utilizzo di modelli appositamente sviluppati che prendono il nome di “*sub-grid scale models*” ovvero “modelli delle scale di sottogriglia”. Brevemente quindi, la principale differenza che si ha nelle simulazioni LES è quella di calcolare direttamente i vortici di grande scala modellando tutti i rimanenti vortici che portano alla dimensione caratteristica dei vortici di Kolmogorov.

Se ne deduce che occorre definire una netta separazione fra quelli che saranno i vortici da calcolare direttamente e quelli di più piccola dimensione che dovranno essere modellati.

Matematicamente si può pensare di separare il campo delle velocità in due parti; una prima risolta direttamente e la seconda parte, di sottogriglia, modellata. La modellazione viene fatta utilizzando un “*SGS model*” (*sub-grid scale model*).

La suddivisione delle due parti avviene per mezzo di una operazione di filtraggio che definisce una dimensione dei vortici sotto la quale essi verranno modellati.

Questa operazione di filtraggio modifica le equazioni di governo istantanee presentate nel capitolo iniziale fornendo la versione “filtrata” di queste equazioni sviluppate per l'approccio LES. Queste operazioni di filtraggio, che verranno descritte nel capitolo successivo, possono essere eseguite matematicamente nello spazio fisico tempo-dipendente nel caso di simulazioni che coinvolgano filtri più semplici, oppure passando ad un filtraggio condotto nello spazio delle frequenze utilizzando l'operatore trasformata di Fourier. L'utilizzo di questo operatore obbliga alle inevitabili operazioni di trasformata ed antitrasformata nello spazio di Fourier ma consente notevoli semplificazioni matematiche nel caso si debbano utilizzare filtri più complessi che nel dominio del tempo comporterebbero l'inevitabile risoluzione di integrali molto complessi.

Nel capitolo che segue si scenderà con maggior dettaglio nella esposizione del filtraggio che assume un ruolo di primaria importanza nello svolgimento di una simulazione LES. Una volta chiare queste operazioni (principalmente focalizzate sull'utilizzo del “*box filter*” utilizzato nelle simulazioni) si giungerà alle equazioni che governano questo modello di turbolenza per avere un riassunto indispensabile alla lettura dei risultati delle simulazioni eseguite nei capitoli successivi.

3.3.2 – Operazioni e tipi di filtraggio LES

In letteratura si possono esaminare diverse tipologie di filtri matematici disponibili per l'utilizzo nelle simulazioni LES. Per tutte le tipologie occorre fissare arbitrariamente una dimensione dei vortici sotto la quale eseguire il filtraggio. In altre parole la taglia del filtro identifica una dimensione caratteristica minima del vortice che consentirà di mantenere e simulare direttamente i vortici più grandi ed eliminare quelli più piccoli che verranno modellati con la scelta di un modello di sottogriglia.

La scelta della taglia del filtro che risulta più semplice e comoda è quella che prevede di identificare questa taglia con la dimensione delle celle numeriche di calcolo in cui il dominio computazionale è suddiviso. Quindi, se si suppone di indicare con Δ la dimensione caratteristica della griglia di calcolo, allora sarà possibile identificare le scale di sottogriglia utilizzando un filtro di grandezza Δ . Il filtraggio si realizza, matematicamente, con l'operazione di *convoluzione* [4] di una funzione del tipo:

$f(\mathbf{x}, t)$

dove $f(\bar{x}, t)$ è una funzione che rappresenta la generica variabile del flusso, mutabile nello spazio e nel tempo.

La convoluzione di f è una operazione tra funzioni e necessita pertanto, oltre ad f stessa, di una seconda funzione che verrà chiamata “funzione filtro”, della forma:

$G_{\Delta}(\mathbf{x})$

che risulta costante al variare del tempo.

La funzione di convoluzione in esame è la seguente:

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{G}_{\Delta}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x}$$

Secondo questa espressione ogni grandezza caratteristica del flusso, rappresentata in generale da f , viene manipolata dal filtro G_{Δ} che, in base al tipo di filtro scelto, taglia o comunque semplifica la forma della funzione. I filtri più utilizzati sono costruiti ed ottimizzati per tagliare le fluttuazioni di minore importanza delle grandezze manipolate che non portano informazioni necessarie al fine di catturare e conservare invece le informazioni medie più importanti. La precisione dell’informazione filtrata dipende ovviamente dalla capacità di filtraggio della funzione G_{Δ} .

Fra le funzioni filtro di maggior utilizzo, le più ricorrenti ed importanti sono:

- *Box filter function* – Funzione filtro a scatola.
- *Gaussian filter function* – Funzione filtro Gaussiano
- *Sharp spectral filter* – Funzione filtro spettrale

Si porrà la maggior attenzione sul primo tipo di filtro, il più semplice e maneggevole, che sarà utilizzato nelle simulazioni LES presentate nei capitoli successivi.

Modellazione del “Box filter”

Un filtro a scatola, nello spazio fisico tempo-dipendente è definito nel seguente modo [4]:

$$G_{\Delta}(\mathbf{x}) = G_{\Delta}(x, y, z) \begin{cases} \frac{1}{\Delta} & \text{se } |\mathbf{x}| \leq \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Se si analizza la sua formulazione si potrà notare che per valori di x , y e z compresi all’interno dell’intervallo $\left[-\frac{\Delta}{2}; \frac{\Delta}{2}\right]$ si ottiene un volume cubico di lati pari a Δ all’interno del quale il filtro assume valore costante e pari a $\frac{1}{\Delta}$. Per valori di x esterni a questo cubo di taglia Δ la funzione filtro non assume valori essendo identicamente nulla.

Una funzione così strutturata, che assume cioè i valori $\frac{1}{\Delta}$ e 0, può essere operativamente realizzata discriminando fra le due possibili soluzioni per mezzo della *Heaviside Function* H (la nota

funzione segno) che risulta pari all'unità per valori maggiori di zero e nulla altrimenti. Il suo utilizzo si concretizza nel seguente modo:

$$G_{\Delta}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\Delta} \cdot H\left(\frac{1}{2}\Delta - |\mathbf{x}|\right)$$

Si noterà che all'aumentare di Δ (ovvero al crescere della taglia della cella) il valore costante che il filtro assume all'interno del *box* è via via decrescente in quanto dato da $\frac{1}{\Delta}$. All'aumentare della dimensione di cella il filtro assume quindi valori sempre più piccoli.

ESEMPIO

Per meglio comprendere l'azione di un *box filter* conviene riferirsi, in primo luogo, ad una funzione semplificata, con successiva estensione dei risultati ottenuti alle funzioni più complesse.

Considerando una qualsivoglia grandezza di flusso f , come ad esempio una componente della velocità u in una direzione dello spazio, si avrà che u risulterà essere una variabile aleatoria funzione di t e della direzione x dello spazio tridimensionale (consideriamo cioè nulle le componenti v e w).

Se si prende in esame l'andamento della funzione velocità $u(x, t)$ ad una dato istante di tempo prestabilito otterremo che la u dipenderà dall'unica variabile x del vettore \mathbf{x} ottenendo così una funzione semplificata rappresentabile in un piano bidimensionale del tipo:

$$f(x, t) = u(x)$$

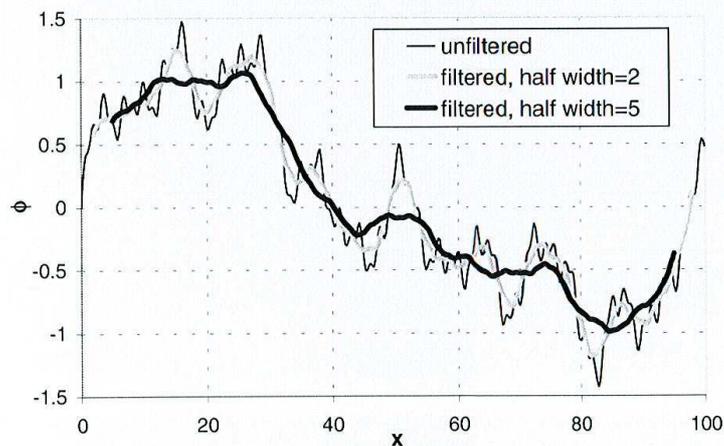


Fig 3.2

Come si vede dalla figura sopra riportata, il segnale di velocità $u(x)$ è estremamente variabile e presenta fluttuazioni tipiche di una grandezza soggetta a tutte le scale caratteristiche del moto turbolento.

Ciò che si vuole ottenere è un filtraggio della u allo scopo di eliminare tutte le fluttuazioni che nascono dalle scale caratteristiche aventi dimensioni minori della cella numerica di calcolo.

- Supponiamo che la dimensione media della cella del dominio di calcolo sia pari a Δ
- Volendo dunque filtrare questa funzione consideriamo un box filter $G_{\Delta}(r)$ della forma:

$$G_{\Delta}(r) = \begin{cases} 1/\Delta & \text{se } |r| \leq \frac{\Delta}{2} \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

In altre parole :

$G_{\Delta}(r) = \frac{1}{\Delta}$ per $-\frac{\Delta}{2} \leq r \leq \frac{\Delta}{2}$ mentre risulta nullo per tutti gli altri valori di r come risulta dalla seguente rappresentazione grafica:

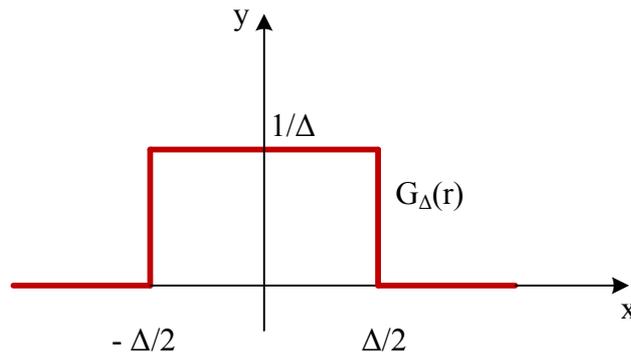


Fig 3.3

- Per applicare il filtro così realizzato al profilo di velocità u in esame occorre costruire la funzione di convoluzione (in questo caso monodimensionale) fra $u(x)$ e $G_{\Delta}(r)$ che assumerà la seguente forma:

$$\bar{u}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} u(x-r) \cdot G_{\Delta}(r) \cdot dr$$

Per la soluzione dell'integrale si nota che $G_{\Delta}(r)$ assumerà valori diversi da zero nel solo intervallo:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} ; \frac{\Delta}{2} \right]$$

e pertanto possiamo scomporre l'integrale nel seguente modo:

$$\bar{u}(x) = \int_{-\infty}^{-\Delta/2} u(x-r)G_{\Delta}(r)dr + \int_{-\Delta/2}^{+\Delta/2} u(x-r)G_{\Delta}(r)dr + \int_{+\Delta/2}^{-\infty} u(x-r)G_{\Delta}(r)dr$$

Ottenendo:

$$\bar{u}(x) = \int_{-\Delta/2}^{+\Delta/2} u(x-r) \cdot \frac{1}{\Delta} \cdot dr \quad \rightarrow \quad \bar{u}(x) = \frac{1}{\Delta} \cdot \int_{-\Delta/2}^{+\Delta/2} u(x-r) \cdot dr$$

L'integrale ottenuto ha la stessa struttura della seguente espressione:

$$\phi = \frac{1}{\Delta T} \cdot \int_{-\Delta T/2}^{\Delta T/2} \varphi(t) \cdot dt$$

Definita come “media della generica proprietà del flusso $\varphi(t)$ nel tempo”.

Quindi l'espressione filtrata ottenuta rappresenta la media locale di u in un intorno di x di dimensione pari a $\frac{\Delta}{2}$, ovvero sulla dimensione di una cella di calcolo. Da ciò segue che $\bar{u}(x)$ è una versione filtrata di $u(x)$ nella quale le fluttuazioni di u derivanti dalle scale caratteristiche più piccole di Δ sono state eliminate.

Allo stesso modo di quanto visto in questo esempio monodimensionale si potrebbe fare altrettanto considerando r una variabile avente tre componenti spaziali, e ripetendo gli stessi calcoli che porterebbero ad un *box filter* cubico e tridimensionale di dimensione media equivalente a quello della cella media, all'interno del quale si ha il valore costante $G_{\Delta}(r) = 1/\Delta$, e ad una espressione finale di u media sulla cella in cui sono state eliminate le componenti fluttuanti derivanti dalle piccole scale del moto.

3.3.3 – Equazioni filtrate di bilancio per simulazioni LES

Per ottenere le equazioni filtrate si parte dalle equazioni istantanee di base viste al capitolo uno (Conservazione della massa, bilancio dei momenti,..). Da esse si impone di eseguire il filtraggio scegliendo preventivamente la tipologia ed una opportuna taglia del filtro. Considerando una generica grandezza ϕ , essa verrà scomposta nelle seguenti due parti:

- Un termine filtrato $\check{\phi}$ che differisce dalla grandezza ϕ di partenza per la perdita di tutte le fluttuazioni di ϕ aventi dimensione spaziale più piccola della maglia del filtro.
- Un termine residuo ϕ_r (detto di sottogriglia) costituito da tutte le informazioni tagliate, che non saranno quindi direttamente risolte nelle simulazioni numeriche

Il legame fra i due termini è il seguente:

$$\phi = \check{\phi} + \phi_r$$

Con la generica grandezza ϕ si vogliono indicare tutte le grandezze scalari, vettoriali o tensoriali di tipo fluttuante nel tempo e nello spazio come ad esempio la velocità e le sue componenti, pressione, frazione di miscela, temperatura e densità o altre grandezze caoticamente variabili nel campo di moto.

La formulazione delle equazioni di bilancio può assumere principalmente due forme distinte a seconda che se ne consideri l'applicazione a fluidi incomprimibili o comprimibili [5][2][12]. Le simulazioni di combustione si appoggiano all'uso della forma comprimibile nonostante la grande maggioranza delle applicazioni pratiche facciano uso della formulazione più semplice di queste

equazioni. Le applicazioni incompressibili inoltre sono avvantaggiate da un più avanzato sviluppo dei modelli di sottogriglia disponibili in letteratura.

Equazione filtrata di conservazione della massa per fluidi incompressibili

Volendo partire dalla formulazione incompressibile è opportuno riportare l'equazione generale di partenza vista al capitolo primo:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \mathbf{u}) = 0$$

Con questa semplificazione si può considerare la densità costante:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = 0$$

Da questa semplice forma, filtrare questa equazione significa filtrare la funzione velocità eliminando tutte le fluttuazioni di dimensione più piccola del filtro di *cut-off*. Scelta una dimensione del filtro esso eseguirà il taglio. Questo si può rappresentare, come visto proponendo la seguente suddivisione:

$$\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{u}''$$

Le fluttuazioni tagliate, o di sottogriglia (rappresentate dal termine \mathbf{u}'') non vengono risolte ma modellate dall'*SGS model* e perciò non verranno considerate nell'equazione filtrata la cui espressione sarà:

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{x}} = 0$$

Equazione filtrata di bilancio dei momenti per fluidi incompressibili

Partendo dall'equazione di bilancio dei momenti vista al capitolo primo e indicando l'operatore gradiente con il simbolo ∇ si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \bar{\boldsymbol{\tau}} + \rho \mathbf{f}$$

Considerando ancora un fluido incompressibile (a densità costante) e supponendo per semplicità nulla l'azione delle forze di massa si ha:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \bar{\boldsymbol{\tau}} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{u} \mathbf{u}) = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \bar{\boldsymbol{\tau}}$$

Nel seguito risulta più comodo esprimere l'equazione vettoriale vista con la notazione di Einstein:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \mathbf{u}_i & \text{con} & & \mathbf{u}_i &= \{u, v, w\} \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}_j & & & \mathbf{u}_j &= \{u, v, w\} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial x_j}(\boldsymbol{\tau}_{ij})$$

Al posto del tensore newtoniano degli sforzi, τ_{ij} , è possibile esprimere l'equazione in funzione del tensore delle deformazioni S_{ij} , esprimendo il legame reciproco:

$$\tau_{ij} = \nu \cdot \rho \cdot \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\} \quad ; \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right\} \quad \rightarrow \quad \tau_{ij} = 2\nu\rho \cdot S_{ij}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i \cdot u_j) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\nu \cdot S_{ij})$$

Si passa ora all'esecuzione del filtraggio. Viene cioè definita per ogni quantità fluttuante nel tempo e nello spazio una parte filtrata ed una parte residua di sottogriglia:

$$u_i = \tilde{u}_i + u_{ir} \quad P = \tilde{P} + P_r \quad S_{ij} = \tilde{S}_{ij} + S_{ijr}$$

Di queste quantità verrà direttamente risolta la sola componente filtrata tralasciando la componente residua i cui effetti sono legati al modello di sottogriglia:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i \cdot u_j}) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\nu \cdot \tilde{S}_{ij})$$

Aggiungendo ad ambo i membri il termine $\frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j)$ si ottiene:

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i \cdot u_j}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\nu \cdot \tilde{S}_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j)$$

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{u_i \cdot u_j} - \tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j] + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\nu \cdot \tilde{S}_{ij})$$

In quest'ultima espressione il termine racchiuso fra parentesi quadre rappresenta il “*Tensore degli sforzi di sottogriglia*” che sarà indicato come:

$$\tau_{ij}^R = \overline{u_i \cdot u_j} - \tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j$$

Riarrangiando si giunge all'espressione filtrata dell'equazione di bilancio dei momenti proposta nel caso di fluidi incomprimibili

$$\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j) = -\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (2\nu \cdot \tilde{S}_{ij} - \tau_{ij}^R)$$

Si nota che il procedimento utilizzato per ricavare questa espressione filtrata può sembrare molto simile a quello utilizzato per ottenere la corrispondente equazione nel caso di simulazioni RANS. Occorre però distinguere la natura ben diversa fra un valore mediato secondo Reynolds ed un valore filtrato. Mentre il primo è una grandezza vettoriale media ottenuta tagliando le componenti fluttuanti, nel caso filtrato si ha sempre a che fare con vettori tridimensionali variabili nel tempo e nello spazio a cui sono solo state eliminate le fluttuazioni più piccole della taglia del filtro.

Equazione filtrata di bilancio dell'energia per fluidi incomprimibili

Con lo stesso procedimento si ricava l'espressione filtrata dell'equazione dell'energia. Data l'espressione istantanea dell'equazione dell'energia, indicata nel paragrafo 1.1.7.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla(\mathbf{u}(\rho E + P)) = \nabla \left(-(\lambda_c \cdot \nabla T) - \sum_j h_j \cdot \mathbf{J}_j + (\boldsymbol{\tau}_{ij} \mathbf{u}) \right) + S_h$$

E definendo per semplicità di notazione:

$$\mathbf{H} = \sum_j h_j \cdot \mathbf{J}_j$$

è possibile, ripercorrendo l'operazione di filtraggio ottenerne l'espressione filtrata [13][7]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \check{E}) + \nabla(\check{\mathbf{u}}(\bar{\rho} \check{E} + \bar{P})) = \nabla(\lambda_c \cdot \nabla \bar{T} - \mathbf{H}_j^R)(\tau_{ij}^R \check{\mathbf{u}}) + S_h$$

Nella quale τ_{ij}^R è il termine residuo del tensore degli sforzi di sottogriglia già indicato nelle equazioni di bilancio dei momenti mentre \mathbf{H}_j^R è la frazione residua derivante dal filtraggio della sorgente interna di energia a sua volta determinabile funzione dell'Energia totale del sistema secondo la seguente relazione

$$\mathbf{H}_j^R = \bar{\rho}(\check{E} \check{\mathbf{u}}_j - \check{E} \check{\mathbf{u}}_j) + (\overline{P \mathbf{u}}_j - \bar{P} \check{\mathbf{u}}_j)$$

Equazione filtrata di conservazione della massa per fluidi comprimibili

Nel caso di fluidi comprimibili l'equazione di conservazione della massa diventa inevitabilmente più complessa a causa dell'impossibilità di ritenere costante la densità del fluido al variare del tempo e dello spazio. In generale, partendo dall'espressione istantanea dell'equazione in esame, è possibile seguire due approcci:

- 1) Il primo, ha il difetto di essere più approssimativo ma allo stesso tempo il pregio di semplificare notevolmente l'espressione matematica del filtraggio dell'equazione di continuità. Esso consiste nell'applicare la media di Favre alle variabili di flusso filtrate dalla LES:

$$\overline{\rho \cdot \phi} = \bar{\rho} \cdot \check{\phi}$$

Mentre nell'operazione di media secondo Favre il soprasegno indica una media (si veda il paragrafo relativo) nell'applicazione LES si utilizza tale simbolo per indicare l'operazione di filtraggio. Si noti che pur avendo cambiato il significato del segno la formulazione matematica rimane invariata. Ciò che si ottiene è che il filtraggio di ϕ fornisce le quantità:

$$\phi = \check{\phi} + \phi_r$$

da cui:

$$\overline{\rho \cdot \phi} = \overline{\rho \check{\phi} + \rho \phi_r} = \overline{\rho \check{\phi}} + \overline{\rho \phi_r}$$

Seguendo la procedura utilizzata nella formulazione della media di Favre, si impone ora la semplificazione del prodotto filtrato di densità e fluttuazioni filtrate ϕ_r :

$$\overline{\rho \phi_r} = 0$$

Si giunge all'espressione di partenza: $\overline{\rho \cdot \phi} = \overline{\rho} \cdot \check{\phi}$

Se si inserisce questo risultato nell'equazione di continuità istantanea se ne ottiene la forma filtrata per fluidi comprimibili (con approccio di tipo Favre):

$$\overline{\rho \cdot \phi} = \overline{\rho} \cdot \check{\phi} \quad \rightarrow \quad \overline{\rho \cdot \mathbf{u}} = \overline{\rho} \check{\mathbf{u}}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\overline{\rho} \check{\mathbf{u}}) = 0$$

- 2) Il secondo approccio, più fisico e di conseguenza più complesso, si propone di non semplificare il carattere aleatorio della densità come visto al punto (1) [13], ma di tenere traccia della variazione puntuale di ρ nel tempo e nello spazio.

(vedi sul Peters come si ottiene $\overline{\rho \mathbf{u}} - \overline{\rho} \cdot \check{\mathbf{u}}$ dove c'è la dimostrazione di Favre a paragone con la soluzione tradizionale)

L'espressione dell'equazione comprimibile di conservazione della massa assumerà allora la sua forma più generale:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\overline{\rho} \cdot \check{\mathbf{u}}) = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\overline{\rho \mathbf{u}} - \overline{\rho} \check{\mathbf{u}})$$

Equazione filtrata di bilancio dei momenti per fluidi comprimibili

L'espressione filtrata dell'equazione di bilancio per fluidi comprimibili può essere espressa mediante un approccio tipo media di Favre nella quale valgono sempre le condizioni:

$$\phi = \check{\phi} + \phi_r \quad ; \quad \overline{\rho \cdot \phi} = \overline{\rho} \cdot \check{\phi} \quad ; \quad \overline{\rho \phi_r} = 0$$

a cui si aggiunge la seguente per il filtraggio secondo Favre del termine di trasporto:

$$\overline{\rho \cdot \phi \cdot \phi} = \overline{\rho} \cdot \check{\phi} \check{\phi}$$

Al posto della generica variabile ϕ si inseriscono le grandezze tempo-spazio variabili presenti nell'equazione di bilancio:

$$\overline{\rho \mathbf{u}_i} = \bar{\rho} \cdot \check{\mathbf{u}}_i$$

$$\overline{\rho \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j} = \bar{\rho} \cdot \overline{\mathbf{u}_i \mathbf{u}_j}$$

Esse saranno utilizzate per filtrare l'equazione di bilancio a partire dalla sua formulazione istantanea comprimibile:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j) = -\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tau_{ij}) \quad \rightarrow \quad \tau_{ij} = 2\nu\rho \cdot \mathbf{S}_{ij}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \mathbf{u}_i \mathbf{u}_j) = -\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(2\nu\rho \cdot \mathbf{S}_{ij})$$

Si esegue dunque il filtraggio:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \cdot \overline{\mathbf{u}_i \mathbf{u}_j}) = -\frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(2\nu\bar{\rho} \cdot \bar{\mathbf{S}}_{ij})$$

Aggiungendo ad ambo i membri il termine $\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho}(\check{\mathbf{u}}_i \cdot \check{\mathbf{u}}_j)$ si ottiene:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \cdot \overline{\mathbf{u}_i \mathbf{u}_j}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i \check{\mathbf{u}}_j) = -\frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(2\nu\bar{\rho} \cdot \bar{\mathbf{S}}_{ij}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i \check{\mathbf{u}}_j)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho}[\overline{\mathbf{u}_i \mathbf{u}_j} - \check{\mathbf{u}}_i \check{\mathbf{u}}_j] = -\frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(2\nu\bar{\rho} \cdot \bar{\mathbf{S}}_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i \check{\mathbf{u}}_j)$$

In cui ponendo:

$$\tau_{ij}^R = \overline{\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j} - \check{\mathbf{u}}_i \cdot \check{\mathbf{u}}_j$$

Da cui si ottiene l'espressione canonica normalmente utilizzata:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \check{\mathbf{u}}_i \check{\mathbf{u}}_j) = -\frac{\partial \bar{\mathbf{P}}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(2\nu\bar{\rho} \cdot \bar{\mathbf{S}}_{ij}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho}[\tau_{ij}^R]$$

3.3.4 – Modellazione delle scale di sottogriglia – Il modello di Smagorinsky

Per comprendere l'importanza dell'introduzione di un modello di sottogriglia occorre porre l'attenzione sul meccanismo di trasferimento dell'energia cinetica turbolenta. Questo importante meccanismo interessa tutte le scale di grandezza dei vortici partendo dalle grandi scale inerziali fino al raggiungimento della più piccola scala dissipativa. Solo questi più piccoli vortici sono efficaci per dissipare in calore l'energia cinetica ed il solo modo per catturare questo fenomeno con una simulazione numerica è quello di risolvere una simulazione DNS.

Per ovviare la necessità di questo tipo di simulazione, computazionalmente proibitiva, la tecnica LES permette un filtraggio delle piccole scale.

Questo risolve l'onerosità di calcolo ma il filtraggio delle piccole scale vorticoso interrompe bruscamente il trasporto dell'energia cinetica turbolenta e fisicamente questa interruzione è inaccettabile.

Per questo, è necessario introdurre una modellazione delle scale residue in modo da costruire artificialmente l'effetto che le piccole scale eliminate hanno sulle grandi scale simulate.

Questo si fa operativamente introducendo nelle simulazioni un "modello di sottogriglia". Nella simulazione realizzata e descritta nel capitolo 6.2 è stato scelto il modello di Smagorinsky-Lilly, un modello che per la sua semplicità di formulazione risulta molto versatile e robusto per la maggioranza delle simulazioni di interesse pratico.

Il modello di Smagorinsky-Lilly

L'idea che sta alla base del modello di Smagorinsky è quella di simulare l'effetto delle piccole scale sulle grandi introducendo una formulazione della viscosità dei vortici di sottogriglia. Tale viscosità deve essere rappresentativa degli effetti della dissipazione e l'entità della dissipazione può essere derivata dalla teoria $k^{-5/3}$ di Kolmogorov.

L'idea di simulare gli sforzi viscosi con la viscosità nasce con modelli proposti da Prandtl mentre Smagorinsky, partendo da questi modelli ed appoggiandosi alle ipotesi di Boussinesq, cerca di fornire una formulazione del tensore degli sforzi di sottogriglia come funzione della viscosità turbolenta dei vortici tagliati dall'operazione di filtraggio [4].

$$\tau_{ij}^R = \overline{u_i \cdot u_j} - \tilde{u}_i \cdot \tilde{u}_j$$

Il tensore degli sforzi di sottogriglia τ_{ij}^R , ricavato nel paragrafo precedente e qui sopra riportato, è un termine del tutto incognito e tiene conto dello scambio dei momenti che si ha fra scale risolte e scale residue. Le ipotesi di Boussinesq sono normalmente utilizzate per esprimere il tensore degli sforzi nelle simulazioni RANS ma possono essere riviste per esprimere τ_{ij}^R in una simulazione LES [13] [14]:

$$\tau_{ij}^R = 2\rho \cdot (v + v_T) \cdot \tilde{S}_{ij}$$

Il modello di Smagorinsky viene anche chiamato "modello a viscosità turbolenta" perché introduce una modellazione di τ_{ij}^R in funzione di v_T , una viscosità appositamente introdotta per accentuare l'effetto di dissipazione delle scale non risolte. E' proprio questa semplice ed efficace formulazione algebrica che conferisce a questo modello di sottogriglia la sua nota semplicità matematica che lo contraddistingue da altri più complessi modelli di tipo differenziale. Questi ultimi modelli risultano portano sicuramente a una modellazione più aderente alla realtà al prezzo di poter essere utilizzati in un campo meno vasto di casistiche.

Il modello di Smagorinsky propone la seguente formulazione della viscosità turbolenta [12]:

$$\nu_T = (C \cdot \Delta)^2 \cdot |\tilde{S}|$$

Si può notare che, affinché la viscosità turbolenta ν_T modella l'effetto dissipativo, deve essere introdotta nella sua formulazione una dipendenza dalla taglia del filtro scelto, ovvero Δ . Questo permette di rendere attiva l'azione di ν_T alle scale residue, che cambiano in funzione della maglia del filtro.

La costante C è detta costante di Smagorinsky. Essa è determinata sulla base dell'esperienza e assume valori differenti in funzione del tipo di simulazione da risolvere. L'imposizione di questa costante è spesso il punto debole del modello di sottogriglia di Smagorinsky che può portare a soluzioni diverse variabili con il settaggio di C . Questo problema viene risolto da sviluppi successivi del modello e dall'introduzione di modelli differenti come i modelli dinamici di Lilly-Germano che non sono però stati considerati in questa sede e saranno indubbiamente oggetto di ricerca in un prossimo futuro.

4 APPROCCIO ALLA MODELLAZIONE DELLA COMBUSTIONE NON - PREMISCELATA

4.1 Caratteristiche della combustione non-premiscelata.

La caratteristica principale che contraddistingue una combustione di tipo non-premiscelato è l'ingresso separato di combustibile e comburente all'interno della zona di reazione. Solo con l'incontro dei reagenti ha luogo l'inizio della reazione di combustione che si manifesta nel sottile strato, comunemente chiamato "inner layer", in cui l'intimo miscelamento di combustibile e comburente si attesta al valore stechiometrico.

In questi termini si comprende come il cuore della fiamma si sostenga sull'isosuperficie tridimensionale in cui la miscela è stechiometrica, spingendosi solo limitatamente verso le zone ricche e povere della fiamma. Allontanandosi infatti dalla superficie stechiometrica, lato combustibile o lato comburente, la miscela diventa rispettivamente troppo ricca o troppo povera fino a raggiungere valori del rapporto di equivalenza locale per i quali la combustione non riesce ad auto sostentarsi. Si giunge così a bruschi cali di temperatura e spegnimenti puntuali che conducono all'estinzione della fiamma stessa. Da quanto detto se ne deduce una forte dipendenza delle fiamme non-premiscelate dalla turbolenza con cui si realizza l'incontro ed il miscelamento dei reagenti. Alti valori della turbolenza possono infatti generare fluttuazioni e discontinuità nella superficie stechiometrica, vitale per il sostentamento della fiamma, portando alla sua estinzione [15].

In generale una fiamma non-premiscelata è più semplice da realizzare (basti pensare ad una tipica candela, la combustione di legname, ecc..) e storicamente questo tipo di combustione è sempre stata molto più utilizzata sia nei bruciatori civili ed industriali, che nelle combustioni dei più diffusi sistemi energetici. Il successivo sviluppo della combustione premiscelata, se pur più difficile da controllare, è stata incentivata dalla migliore capacità di controllo sulle emissioni inquinanti, che nel caso non-premiscelato risulta sicuramente più complesso. Rimane il fatto che la maggior parte dei bruciatori, ad esempio quelli installati sulle MTG in esame, mantengono per motivi geometrici e per il contenimento dei costi, fiamme non-premiscelate di tipo diffusivo che è quindi importante approfondire per migliorarne le prestazioni.

Le fiamme diffusive non-premiscelate non sono caratterizzate da uno spessore di fiamma, quantità variabile punto per punto ed istante per istante perpendicolarmente alla superficie stechiometrica e non presentano una velocità di propagazione (come nel caso delle fiamme premiscelate) in quanto risultano stazionarie e radicate alla zona in cui si ha l'incontro dei reagenti. Subiscono quindi fluttuazioni, imputabili alla turbolenza del miscelamento di combustibile e comburente, oscillando comunque attorno ad una posizione teorica definibile.

L'approccio teorico principalmente utilizzato per lo studio delle fiamme non-premiscelate diffusive si appoggia al valore del rapporto fra il tempo caratteristico della fluidodinamica di grande scala τ_{fl} (*eddy turnover time*) e del tempo caratteristico delle reazioni (*chemical time*) di combustione τ_{ch} .

Il valore assunto localmente dalle quantità τ_{fl} e τ_{ch} condiziona profondamente la struttura di fiamma e di conseguenza la classificazione del tipo di fiamma da modellare [16]. Usualmente risulta molto comodo indicare il rapporto fra le velocità indicate, conosciuto come Numero di Damkohler

Da , con la seguente definizione:

$$Da = \frac{\tau_{fl}}{\tau_{ch}}$$

Con l'utilizzo del numero di Damkohler è possibile studiare il principale comportamento delle fiamme diffuse non-premiscelate, il cui stato di combustione o estinzione è ben rappresentato nella seguente curva, chiamata "*S-shape curve*". In essa si nota come l'esistenza e l'estinzione di una fiamma diffusiva sia fortemente dipendente dal rapporto fra le velocità della chimica e della turbolenza [9]:

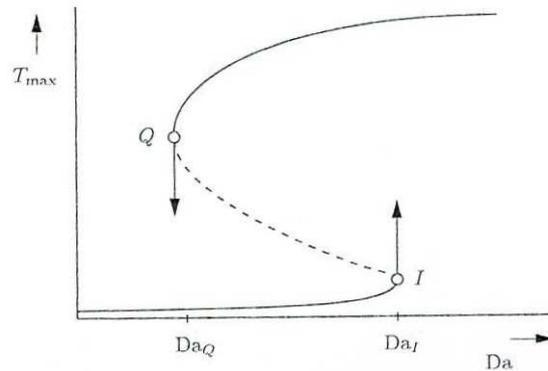


Fig 4.1

In essa si rappresenta il massimo della temperatura in un combustore a flusso omogeneo in funzione del numero di Damkohler (rapporto fra il tempo di residenza e il tempo di reazione chimica). La parte bassa della curva mostra uno stato di reazione lento in quanto precedente all'accensione, dove i bassi tempi di residenza ostacolano una fuga di calore. Se, per esempio, il tempo di residenza tende ad aumentare a causa di una diminuzione delle velocità, il numero di Damkohler tenderà ad aumentare fino al raggiungimento dell'istante di accensione I. Per valori maggiori del Da calcolato nel punto I le perdite di calore porteranno ad un rapido transitorio non stazionario fino a giungere alla zona superiore di quasi-equilibrio. Se da qui ci si muove verso sinistra con l'intento di far decrescere il valore di Da si arriverà al punto Q dove interverrà l'estinzione. Questo causa una rapida transizione nella parte bassa della curva mentre la parte tratteggiata fra I e Q risulta essere instabile.

Nel campo del numero di Damkohler compreso fra Da_0 e Da_I coesistono 2 zone stabili e uno stato di partenza a temperatura compresa in questo *range* si porterà velocemente ad uno dei due stati e conoscendo la forte sensibilità fra temperatura e reazioni chimiche se ne ha che ogni punto è fortemente attratto da entrambe le condizioni. Le reazioni chimiche che si hanno nella parte alta della curva si possono considerare sempre rapide se comparate alla scala temporale della turbolenza e, in aiuto alla diffusione molecolare, esse sono concentrate in un sottile strato di larghezza tipicamente minore rispetto alla scala di Kolmogorov. Questi strati, ad eccezione dei cambi di densità, non possono esercitare altri tipi di retroazione sul flusso e quindi non possono influenzare la dimensione temporale dell'intervallo inerziale. Se questi strati dovessero estinguersi a causa dell'eccessiva perdita di calore si avrà un abbassamento della temperatura a decorrere dal momento in cui la chimica diventerà lenta e anche il miscelamento potrà essere nuovamente descritto con

l'“intervallo temporale di inerzia” classico. In entrambe le situazioni di chimica veloce o lenta, le scale di tempi e lunghezze per la combustione sono separate nel sottointervallo di inerzia da quelle per la turbolenza. Questa separazione delle scale è una caratteristica specifica di molte applicazioni pratiche di turbolenza.

Prendendo in esame una fiamma diffusiva non-premiscelata generica, le principali caratteristiche possono essere visualizzabili nel seguente grafico [2]:

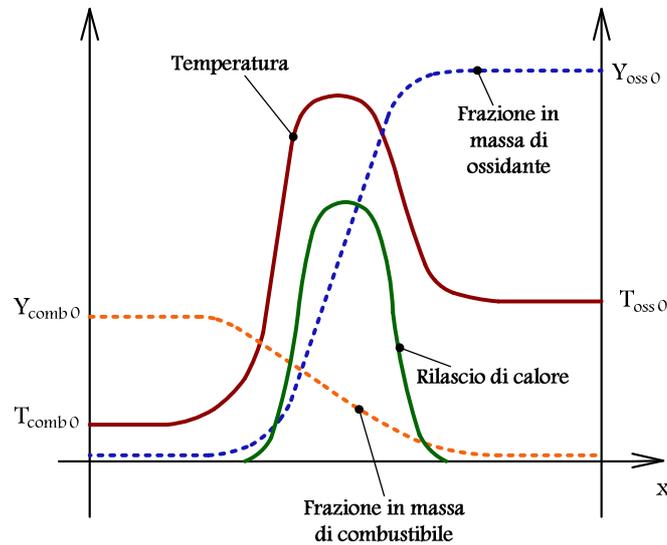


Fig 4.2

In esso non sono riportate grandezze numeriche, dipendenti dal tipo di fiamma in esame, ma l'andamento tipico delle curve rappresentanti le frazioni in massa delle specie Y_{comb} e Y_{oss} , la temperatura T e il rilascio di calore di una fiamma diffusiva. Si nota principalmente il raggiungimento dei valori massimi di T e del rilascio di calore in prossimità della frazione stechiometrica dei reagenti. Dalla superficie stechiometrica infatti, il calore viene allontanato verso l'esterno per diffusione e trasporto dei reagenti in combustione e continuamente rinnovato dal calore generato dai nuovi reagenti incombusti che si portano a bruciare sulla superficie stechiometrica.

Le caratteristiche di una fiamma diffusiva sono alla base di tutti i principali modelli numerici per la simulazione delle fiamme diffusive non-premiscelate. Esistono in particolare modelli di combustione non-premiscelata adatti agli alti valori del numero di Damkohler, laddove cioè si ipotizza una fiamma in cui il tempo caratteristico chimico di sviluppo della combustione è trascurabile rispetto al tempo fluidodinamico. La situazione può essere identificata da un valore infinito del Numero di Damkohler causato dal fatto che la chimica viene considerata infinitamente veloce con un tempo di progressione tendente a zero :

$$\tau_{ch} \gg \tau_{fl}$$

$$Da = \frac{\tau_{fl}}{\tau_{ch}} \rightarrow \frac{\tau_{fl}}{0} = \infty$$

La modellazione di questa condizione di combustione viene richiamata in molti modelli presentati in letteratura quali il modello all'equilibrio, e i modelli *Laminar Flamelet*. Altri modelli sono invece

più adatti a rappresentare tempi di miscelamento paragonabili a quelli della chimica di combustione, che però non saranno considerati in questa sede a meno di alcune applicazioni del modello *Unsteady Flamelet* [17].

I modelli suddetti saranno presentati con maggior dettaglio nel paragrafo 4.2 seguente.

4.2 Modelli di combustione non-premiscelata utilizzati

4.2.1 – Modelli Eddy Dissipation ed Eddy Dissipation – Finite Rate

Il modello Eddy-Dissipation è un modello semplice per la chiusura dei termini di generazione ed è in grado di dare buoni risultati solo quando le reazioni chimiche sono molto più veloci dei fenomeni di mescolamento che portano a contatto combustibile e comburente. Il modello determina le caratteristiche di una fiamma in base alla fluidodinamica e la combustione avviene là dove il campo di moto riesce a miscelare combustibile e comburente .

Per determinare il tasso di reazione, si calcolano le velocità di reazione caratteristiche di tutte le specie che partecipano al processo chimico e poi se ne sceglie quella effettivamente limitante, cioè la minima. In particolare, il tasso netto di produzione della specie s dovuto alla reazione r , è dato dal valore più piccolo delle seguenti due espressioni:

$$\omega_{sr} = v_{sr} W_s A \rho \frac{\varepsilon}{k} \cdot \min \left(\frac{x_R}{v_{Rr} \cdot W_R} \right)$$

$$\omega_{sr} = v_{sr} W_s A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P x_P}{\sum_{s=1}^N v_{sr} W_s}$$

in cui A e B sono delle costanti adimensionali ($A = 4$, $B = 0,5$), x_R rappresenta la frazione in massa del particolare reagente considerato mentre x_P è la frazione in massa di ciascun prodotto di combustione, k è l'energia cinetica turbolenta ed ε è la velocità di dissipazione dell'energia turbolenta. Il rapporto k/ε viene detto *tempo caratteristico di miscelamento* ed ovviamente mantiene le dimensioni di un tempo.

La semplicità di tale modello produce inevitabili limiti, in quanto la combustione è caratterizzata, nella realtà, da una serie di reazioni con tempi caratteristici non necessariamente piccolissimi, ma che cadono in un intervallo temporale molto ampio e che in funzione del valore assunto dal numero di Damkohler in una fiamma, possono anche eguagliare o eccedere i tempi di miscelamento.

Se le uniche informazioni necessarie riguardano le dimensioni della fiamma e la stima del campo di temperatura, l'applicazione di tale modello può comunque essere presa in considerazione, almeno come punto di partenza per l'applicazione di modelli più raffinati.

Se si vuole prevedere un numero maggiore di specie chimiche e reazioni, per studiare, ad esempio, la formazione di inquinanti, non è possibile utilizzare il modello ED, ma è necessario ricorrere a modelli più complessi e costosi dal punto di vista computazionale.

Un ulteriore limite di questo modello è dovuto al fatto che la combustione è legata alla presenza della turbolenza ed in assenza di turbolenza si estingue anche il fenomeno di combustione, che rende il modello inadatto a fiamme laminari o fiamme turbolente nelle quali siano comprese regioni laminari del campo di moto. In ultimo va indicato che per iniziare la combustione non è necessaria una sorgente di ignizione e questo può essere, per alcuni tipi di fiamme un limite, nel senso che è in genere accettabile per fiamme non-premiscelate, ma in fiamme premiscelate i reagenti brucerebbero appena entrati nel dominio computazionale.

Per risolvere tali problemi, FLUENT propone il modello ED-FR. Il modello ED-FR si ottiene dalla implementazione combinata del modello *Eddy Dissipation* e del modello *Finite rate* esistenti singolarmente in letteratura. In quest'ultimo viene calcolato anche il termine di generazione chimica dato da Arrhenius, che a rigore si avrebbe soltanto nel caso di miscelazione perfetta dei reagenti.

Successivamente viene eseguito un confronto tra la velocità di reazione data dal modello ED e quella di Arrhenius e viene scelta quella limitante, cioè la più piccola delle due.

Questo piccolo accorgimento impedisce che le reazioni chimicamente più lente avvengano comunque in maniera completa come invece verrebbe predetto dal modello ED rendendo il tasso di reazione di Arrhenius uno *switch* cinetico.

Una volta che la fiamma è accesa, il tasso di reazione previsto dal modello ED è in genere più basso di quello di Arrhenius e le reazioni sono controllate dalla fluidodinamica.

Attraverso questa modifica si riescono ad ottenere risultati migliori e più fedeli alla realtà.

4.2.2 – Steady Laminar Flamelet Model

4.2.2.1 – Introduzione

Un modello di combustione più robusto rispetto al precedente modello è il *Laminar Flamelets Model*. La sua maggior completezza risiede nella possibilità di introdurre la chimica di non-equilibrio nei modelli di combustione turbolenta e per questo risulta più completo del modello all'equilibrio presentato di seguito nel paragrafo 4.2.3.

I primi studi sulla possibilità di considerare una fiamma diffusiva turbolenta come l'insieme di tante unità elementari chiamate "*Flamelets*" è dovuta a Williams nel 1975 seguito da Liew nel 1981 mentre una prima formulazione matematica completa per le applicazioni del modello si ha nel 1982 ad opera di Peters che già negli anni precedenti (1980) aveva pubblicato le prime basi della sua teoria sui modelli *flamelets* e sull'impiego della frazione di miscela come variabile indipendente nella formulazione matematica di una *flamelet* [9]

Per "*flamelets*" si intendono sottili strati reattivo-diffusivi inseriti all'interno di campi fluidi in movimento che risulterebbero altrimenti non reagenti. Laddove il miscelamento fra combustibile e comburente è tale da generare e sostenere la combustione si imporrà, come si vedrà in seguito, la presenza di una *flamelet* la cui struttura è realizzata per simulare, nello spazio fluido che la ospita, la combustione.

Interviene quindi una prima importante differenza fra i modelli *flamelet* e altri modelli di combustione, ovvero la possibilità di inserire in opportune posizioni del campo di moto in esame strutture che indipendentemente si occupano di simulare la combustione; interviene cioè la possibilità di dividere in due problemi distinti i fenomeni di combustione dai fenomeni di

miscelamento. Questo primo risultato è sorprendente per quanto riguarda l'aspetto computazionale della soluzione di una combustione; è infatti possibile risolvere dapprima il processo di miscelamento di combustibile ed ossidante per poi imporre nelle posizioni opportune una serie di *flamelets* che indipendentemente dalla loro posizione simuleranno la combustione. Tale processo di combustione, che può coinvolgere innumerevoli reazioni intermedie e svariate specie chimiche reagenti, può cioè essere computazionalmente risolto a parte, per utilizzare solo i risultati del calcolo sulla simulazione in esame. Occorre ora vedere cosa fisicamente una *flamelet* rappresenti e come essa possa matematicamente essere definita.

A tale scopo occorre dapprima introdurre alcuni concetti utili a comprenderne il funzionamento.

4.2.2.2 – Frazione di miscela

Una quantità molto importante da introdurre nella descrizione della combustione non-premiscelata (con particolare riferimento ai modelli *Flamelets* e al successivo modello all'equilibrio) è la frazione di miscela, normalmente indicata con la lettera Z .

A livello molecolare, prima che possano svilupparsi le reazioni chimiche di combustione, occorre una fase di miscelamento fra i reagenti, ovvero una fase nella quale i processi di convezione e diffusione instaurati dal moto turbolento consentano un mescolamento delle correnti di combustibile e comburente. La fase di miscelamento richiede un tempo che normalmente è molto maggiore di quello necessario allo sviluppo delle reazioni di combustione. E' proprio per questo motivo che nella combustione non-premiscelata, dove sono accettate chimiche di combustione molto veloci, diventa di importanza cruciale riuscire a perfezionare un intimo miscelamento fra i reagenti.

Questo è il motivo per cui si ritiene necessario introdurre nello studio della combustione non-premiscelata una nuova variabile indipendente dalla chimica di combustione allo solo scopo di descrivere la bontà e l'evoluzione del miscelamento fra i reagenti. Questa variabile viene chiamata frazione di miscela.

La Frazione di miscela è uno scalare conservativo, caratterizzato cioè dal fatto di non possedere termini sorgente. Essa si utilizza in diversi rami della chimica e non solo in problemi di combustione e per questo esistono diversi modi per definirla.

Nei più classici problemi di combustione diffusiva si ha normalmente a che fare con sistemi reagenti in camere di combustione a cui accedono due correnti fluide separate, una di combustibile ed una di comburente, che perfezionano la loro miscelazione nel loro incontro in camera. Indicando con il pedice “ f “ le entità riferite alla corrente di combustibile e con il pedice “ o “ quelle riferite alla corrente ossidante caratterizzate da un generico valore di portata in massa in ingresso pari a \dot{m}_f ed \dot{m}_o è possibile dare la seguente definizione di Z :

$$Z = \frac{\dot{m}_f}{\dot{m}_f + \dot{m}_o}$$

Z è cioè definita come il rapporto puntuale fra la portata in massa di combustibile e la portata in massa totale calcolabile in ogni posizione del sistema.

Nel caso più semplice (l'unico preso in considerazione) l'entrata del combustibile è separata da quella del comburente e quindi all'ingresso del *fuel* vale $\dot{m}_o = 0$. Dalla definizione data si deduce allora un valore di Z sull'area di ingresso combustibile pari a:

$$Z_{F,u} = 1$$

dove il pedice F indica che il valore di Z si riferisce ad una misura nel condotto di adduzione del combustibile mentre il pedice u ne identifica la sezione di ingresso. Al contrario, nel condotto di ingresso dell'aria varrà $\dot{m}_f = 0$ e si ottiene quindi:

$$Z_{O,u} = 1$$

Man mano che dai due ingressi separati combustibile e comburente si mescolano, sarà possibile definire i valori puntuali della frazione di miscela che risulteranno sempre compresi nell'intervallo:

$$0 \leq Z \leq 1$$

Si riporta, per maggior chiarezza la distribuzione della variabile frazione di miscela in una camera di combustione dove se ne può chiaramente notare la scala compresa fra 0 ed 1 e i punti notevoli sopra citati:

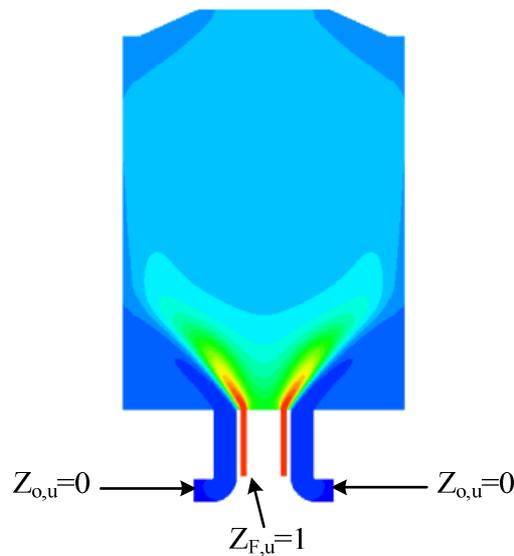


Fig 4.3

In casi leggermente più complessi e di trattazione più generale, è possibile che il combustibile entri in camera già parzialmente premiscelato al comburente e/o a correnti inerti. In tale situazione è verosimile che all'ingresso del combustibile non si abbia più $Z = 1$, né $Z = 0$ all'ingresso del comburente. In particolare, la Z avrà sempre valori intermedi (compresi fra 0 ed 1) e si può ottenere in questo modo una espressione più generale di "frazione di miscela" mettendo la Z in diretta relazione con le frazioni in massa delle specie agenti nel sistema.

Per questa più generale definizione identifichiamo con le seguenti notazioni i diversi punti nei quali si può aver necessità di calcolare la frazione in massa dei reagenti

- Y_F = Frazione in massa generica valutata nella corrente di combustibile

- 1) $Y_{F,f}$ = Frazione in massa di fuel presente nella corrente di combustibile
 - 2) $Y_{F,o}$ = Frazione in massa di comburente (o inerte) presente nella corrente di combustibile
- Y_O = Frazione in massa generica valutata nella corrente ossidante
 - 1) $Y_{O,f}$ = Frazione in massa di fuel presente nella corrente ossidante
 - 2) $Y_{O,o}$ = Frazione in massa di comburente (o inerte) presente nella corrente ossidante

In questo modo sono univocamente determinati i valori della frazione in massa di interesse in qualunque posizione di interesse, sia che si tratti di combustibile che di comburente.

Considerando combustibile e comburente già premiscelati agli ingressi si avrà allora che i valori delle frazioni in massa assunti sulle sezioni di ingresso (contraddistinte dal pedice “u”) non saranno più unitari per combustibile e comburente nei rispettivi ingressi ma potranno essere espressi come funzioni locali della frazione di miscela Z secondo le seguenti espressioni:

$$Y_{F,u} = Y_{F,f} \cdot Z$$

$$Y_{O2,u} = Y_{O2,o} \cdot (1 - Z)$$

Abbinando queste equazioni all'integrazione dell'Equazione per sistemi omogenei

$$s \cdot Y_F - Y_{O2} = s \cdot Y_{F,u} - Y_{O2,u}$$

si ottiene:

$$s \cdot Y_F - Y_{O2} = s \cdot (Y_{F,f} \cdot Z) - Y_{O2,o} \cdot (1 - Z) \quad \rightarrow \quad sY_F - Y_{O2} = sY_{F,f}Z - Y_{O2,o} + Y_{O2,o}Z$$

$$sY_F - Y_{O2} + Y_{O2,o} = Z \cdot sY_{F,f} + Y_{O2,o}Z \quad \rightarrow \quad sY_F - Y_{O2} + Y_{O2,o} = Z \cdot (sY_{F,f} + Y_{O2,o})$$

Da cui si ricava una più generale espressione della frazione di miscela:

$$Z = \frac{s \cdot Y_F - Y_{O2} + Y_{O2,o}}{s \cdot Y_{F,f} + Y_{O2,o}}$$

Questa espressione mette in relazione diretta le frazioni in massa di combustibile e comburente con la frazione di miscela ed è la più generale relazione che si può utilizzare nel caso di singolo ingresso di *fuel* e singolo ingresso di *oxidizer*. In essa infatti si riscontra il caso particolare di ingresso non premiscelato visto due pagine sopra:

$$\text{Per una corrente di ossidante puro: } Y_{F,f} = Y_F = 0, Y_{O2,o} = Y_O = 1 \quad \rightarrow \quad Z = \frac{s \cdot 0 - 1 + 1}{0 + 1} = 0$$

$$\text{Per una corrente di combustibile puro: } Y_{F,f} = Y_F = 1, Y_{O2,o} = Y_O = 0 \quad \rightarrow \quad Z = \frac{s \cdot 1 - 0 + 0}{s \cdot 1 + 0} = 1$$

Nel caso le frazioni in massa locali di combustibile e comburente vengano ad assumere il valore stechiometrico si otterrà un valore di Z ben preciso compreso fra 0 ed 1 funzione del tipo di combustibile utilizzato.

In particolare, essendo $Y_F = Y_F|_{st}$ ed $Y_{O_2} = Y_{O_2}|_{st}$ si può notare che si annulla il seguente termine:

$$s \cdot Y_F - Y_{O_2} = 0 \quad \rightarrow \quad \left(\frac{Y_{O_2}}{Y_F}\right) \cdot Y_F - Y_{O_2} = 0$$

da cui si avrà che [9]:

$$Z = \frac{s \cdot Y_F - Y_{O_2} + Y_{O_2,o}}{s \cdot Y_{F,f} + Y_{O_2,o}} \quad \rightarrow \quad Z_{st} = \frac{Y_{O_2,o}}{s \cdot Y_{F,f} + Y_{O_2,o}} \quad \rightarrow \quad Z_{st} = \left[\frac{s \cdot Y_{F,f} + Y_{O_2,o}}{Y_{O_2,o}} \right]^{-1}$$

$$Z_{st} = \left[s \cdot \frac{Y_{F,f}}{Y_{O_2,o}} + 1 \right]^{-1}$$

Che nel caso dei più comuni combustibili considerati (con ingresso di combustibile ed ossidante puri dai rispettivi ingressi) questo porta a:

$$\text{METANO} \quad \rightarrow \quad s = \frac{\nu_{O_2} \cdot W_{O_2}}{\nu_{CH_4} \cdot W_{CH_4}} = \frac{2 \cdot 32}{1 \cdot 16} = 4 \quad \rightarrow \quad Z_{st} = \left[4 \cdot \frac{1}{0,23} + 1 \right]^{-1} = 0,0544$$

$$\text{PROPANO} \quad \rightarrow \quad s = \frac{\nu_{O_2} \cdot W_{O_2}}{\nu_{C_3H_8} \cdot W_{C_3H_8}} = \frac{5 \cdot 32}{1 \cdot 44} = 3,64 \quad \rightarrow \quad Z_{st} = \left[3,64 \cdot \frac{1}{0,23} + 1 \right]^{-1} = 0,061$$

Sono state quindi espresse le principali caratteristiche della frazione di miscela che, come esposto in seguito, rappresenta una grandezza fondamentale nella formulazione matematica del concetto di *Flamelets*.

4.2.2.3 – Teoria del modello Flamelet – Equazioni di campo

La teoria del modello Laminar Flamelet si basa essenzialmente su alcune ipotesi semplificative di partenza che occorre fissare prima di scendere nel dettaglio del modello:

Ipotesi – Sono state identificate le Flamelets come sottili strati reattivo-diffusivi inseriti in campi fluidi in moto turbolento e indicando con:

ℓ_r = Spessore dell'inner layer (zona nella quale avvengono le reazioni chimiche che sostengono la combustione)

possono verificarsi due condizioni:

La dimensione caratteristica dei più piccoli vortici presenti nel campo di moto turbolento è data dalla dimensione η dei vortici di Kolmogorov. Nel caso in cui l'intensità di turbolenza fosse tale da rendere la taglia di questi vortici minore dello spessore dello strato reattivo-diffusivo delle flamelets si verificherebbe la possibilità, per i più piccoli vortici, di penetrare all'interno della struttura di fiamma elevandone a

tal punto il disturbo da portare alla distruzione di questa struttura in combustione. In tal caso la turbolenza porterebbe la fiamma all'estinzione.

La seconda possibilità prevede invece che la dimensione caratteristica dei vortici di Kolmogorov sia maggiore dello spessore dell' *inner layer* della fiamma. Non riuscendo quindi i vortici turbolenti a penetrare nella cuore della fiamma si può considerare che lo strato reattivo-diffusivo delle flamelets si trovi nel campo fluido quasi-laminare di questi vortici e l'assunzione di una struttura delle Flamelets di tipo laminare può così risultare giustificata

Segue perciò la seconda importante ipotesi per l'applicazione del modello *Laminar Flamelets*:

$$\eta > \ell_r$$

A differenza degli altri modelli di combustione, nei quali la soluzione delle reazioni chimiche stabilisce la posizione di fiamma nel campo di moto fluido, i modelli Flamelets individuano la fiamma come una superficie su cui è posto l'*inner layer*. Per questo motivo la natura aleatoria del fluido in combustione, in tali modelli, si concentra sull'individuare la posizione statistica della superficie di fiamma. Tale superficie è una superficie curva tridimensionale caratterizzata dalla costanza della grandezza scalare " frazione di miscela" e sulla quale saranno perciò posizionate le *flamelets* responsabili di simulare la combustione; su questa superficie quindi le reazioni di combustione diventeranno rapidissime e la temperatura raggiungerà i valori più elevati.

Il primo problema da risolvere è pertanto quello di individuare la posizione della superficie di fiamma (localmente fluttuante nel tempo e nello spazio) sede delle *flamelets* e questo si realizza seguendo le teorie proposte da Peters:

Con riferimento alla combustione non premiscelata è necessario formulare l'equazione di campo per la frazione di miscela, la cui soluzione fornisce la distribuzione media dello scalare Z su tutto il dominio fluido. Tale equazione trae la sua origine dalla generica equazione di trasporto riportata a seguito (vedi capitolo 1) ed imponendo $\phi = Z$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}(\rho\phi\mathbf{u}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\left(D_\phi \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}}\right) + S_\phi$$

Operando le sostituzioni ciò che si ottiene è la seguente equazione:

$$\rho \cdot \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \cdot \mathbf{u} \cdot \nabla Z = \nabla(\rho \cdot D \cdot \nabla Z)$$

Una volta risolta questa equazione sull'intero dominio fluido risulterà definita l'intera superficie di fiamma come superficie della miscela stechiometrica. Essa si ottiene imponendo:

$$Z(\mathbf{x}, t) = Z_{st}$$

Identificata la superficie stechiometrica di fiamma si vedrà in seguito come, applicando su di essa le flamelets sia possibile descriverne la struttura reattivo-diffusiva capace di instaurare la combustione.

E' invece ora importante notare come la soluzione dell'equazione di campo della frazione di miscela non faccia altro che individuare il solo valore medio di Z per ogni punto del dominio. E' chiaro infatti che la natura aleatoria del fluido in esame comporta una distribuzione statistica di valori che Z assume istante per istante e punto per punto. Ne segue quindi che il calcolo del valore medio deve essere accompagnato da una seconda equazione di campo che permetta il calcolo della varianza della frazione di miscela indicata con Z'^2 . Nelle simulazioni numeriche, che prevedono la soluzione di queste equazioni opportunamente discretizzate, è necessario risolvere l'equazione della varianza della frazione di miscela ogni qualvolta si imponga una PDF "presunta" (non direttamente ricavata da una equazione di trasporto esatta). Nelle simulazioni che seguiranno la PDF è stata sempre calcolata utilizzando la presunta β -function e pertanto occorre sempre la soluzione della equazione della varianza di Z .

Tale equazione ha la seguente forma:

$$\rho \cdot \frac{\partial Z'^2}{\partial t} + \rho \cdot \mathbf{u} \cdot \nabla Z'^2 = \nabla(\rho \cdot D_Z \nabla Z'^2)$$

Si noterà come, a confronto con la generica equazione di trasporto di ϕ , l'equazione di campo della Z non presenti una espressione del termine sorgente S_ϕ proprio grazie alla natura conservativa di Z posta per definizione.

Le due equazioni di campo appena introdotte verranno numericamente risolte durante le simulazioni di combustione in abbinamento alle altre equazioni di chiusura del problema, ovvero l'equazione di conservazione della massa e l'equazione di bilancio dei momenti.

4.2.2.4 – Teoria del modello Flamelet – Equazioni delle Flamelets

La struttura della *flamelet* rappresenta il cuore del modello. Una volta determinata la posizione della superficie stechiometrica di fiamma, ciascun elemento costituente questa superficie può essere visto come una piccola fiamma laminare (*flamelet*). Nota la posizione cartesiana tridimensionale di ogni punto nel quale occorre porre una *flamelet* si può pensare di eseguire una trasformazione matematica di coordinate con la quale dallo spazio fisico tridimensionale si passa ad un sistema di coordinate avente origine sulla superficie stechiometrica di fiamma, un sistema quindi definito nello spazio della frazione di miscela risulta essere la nuova ed unica variabile indipendente. Il cambio di variabili è rappresentato graficamente nella figura che segue e si può notare che il nuovo sistema di coordinate è localmente ancorato ad un sistema di iso-superfici a frazione di miscela costante l'una concentrica all'altra ricalcanti la forma assunta dalla superficie avente $Z = Z_{st}$.

Il cambio di variabili, operato con passaggi del tutto matematici, trasforma le equazioni di bilancio delle specie e dell'energia in due corrispondenti equazioni trasformate, funzione di tre nuove coordinate Z_1, Z_2, Z_3 che prendono il posto delle coordinate x, y, z dello spazio fisico [18].

L'utilizzo del modello *laminar flamelet* prevede la possibilità di eseguire ora una importante semplificazione che viene comunemente accettata dalla comunità scientifica per la trascurabile

differenza fra i risultati che si otterrebbero imponendo o meno la semplificazione sulla generica simulazione di combustione:

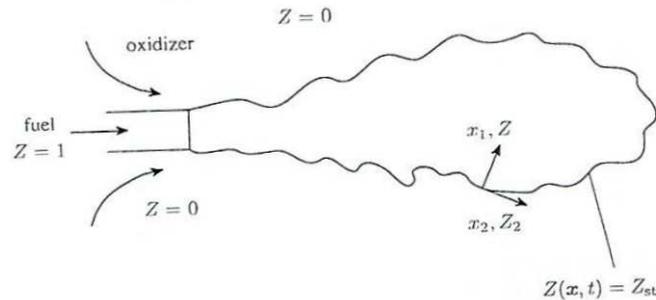


Fig 4.4

Ipotesi semplificativa – Si può pensare di trascurare i gradienti di frazione di miscela che si hanno nelle direzioni individuate dalle coordinate Z_2 e Z_3 la cui direzione è tangente alla iso-superficie della frazione di miscela stechiometrica. Si può infatti chiaramente notare come i più rilevanti gradienti di Z si abbiano muovendosi normalmente alle iso-superfici nella direzione individuata dalla coordinata Z_1 .

Si assume quindi di avere una sola direzione principale sulla quale è individuabile il gradiente della frazione di miscela ritenendo trascurabili le variazioni di miscela che si hanno muovendosi lungo le iso-superfici a Z costante.

Eseguendo il suddetto cambio di variabili, da spazio fisico allo spazio della frazione di miscela, alle N equazioni di bilancio delle specie chimiche ed alla equazione dell'energia espressa per comodità in funzione della temperatura si ottengono le $N + 1$ Equazioni delle *Flamelets* (con N pari al numero delle specie chimiche considerate)

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\chi}{2} \cdot \frac{1}{Le_k} \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} \right) + \frac{\omega_k}{\rho}$$

$$c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} \right) - \sum_{k=1}^N h_k \left\{ \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} \right) + \frac{\omega_k}{\rho} \right\}$$

La prima delle due equazioni riportate viene detta *Flamelet Equation* di conservazione della frazione in massa delle specie mentre la seconda *flamelet equation* riguarda il bilancio dell'energia.

In esse con Y_k si intende la frazione in massa della k -esima specie chimica con $k = 1, \dots, N$ mentre Le_k è il Numero di Lewis. Con il termine χ si indica invece la scalar dissipation.

In particolare, per quanto riguarda la scalar dissipation χ , essa è parametro scalare che riveste una posizione di primaria importanza nel modello in esame. Il suo valore è in generale dato da:

$$\chi = 2 \cdot D_Z \left(\frac{\partial Z}{\partial x_i} \right)^2$$

I flussi diffusivi, dipendenti dai gradienti spaziali, sono fatti dipendere dal gradiente della frazione di miscela e quindi l'influenza del campo di moto è completamente descritta da questa variabile.

L'unità di misura di χ è $[1/s]$ che si può vedere come l'inverso del tempo di diffusione caratteristico da cui se ne deduce che per tempi di diffusione molto piccoli si hanno elevati gradienti e cioè alti valori della *scalar dissipation*. Con tempi lunghi di diffusione i gradienti diventeranno meno evidenti e questo significa avere un χ molto più piccolo che tende nel caso all'equilibrio a zero. Dalla formula compare χ come funzione della frazione di miscela, quindi esso può cambiare all'interno della struttura di fiamma. Esso è inoltre una funzione del tempo e dello spazio:

$$\chi = \chi(Z, t)$$

Una realistica distribuzione di questa variabile può essere trovata studiando una configurazione fisica nella quale si rifletta il carattere monodimensionale delle equazioni delle *flamelets*. Una di queste configurazioni è, ad esempio, la fiamma diffusiva laminare in controcorrente, un punto di ristagno della fiamma laminare [61]. Essa consiste in due ugelli concentrici e circolari diretti uno contro l'altro rappresentati nella seguente figura 4.5:

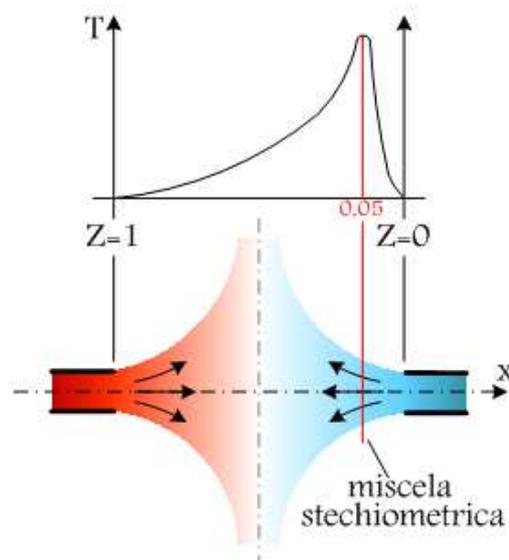


Fig 4.5

Se in uno degli ugelli si ha il combustibile e nell'altro opposto il comburente si avrà lo stabilirsi di una fiamma diffusiva. Questa fiamma usualmente risiede sul lato dell'ossidante sul piano di ristagno nella posizione della miscela stechiometrica Z_{st} . Peters ha mostrato che sotto alcune assunzioni semplificative il profilo di χ della fiamma in controcorrente è una funzione univoca della frazione di miscela Z . Sempre Peters ha inoltre mostrato che la stessa relazione esiste in una configurazione dello strato di miscelamento non stazionario che è un altro campo di miscelamento significativo nella combustione turbolenta. Viene quindi fornita una versione della menzionata relazione esistente fra χ e Z [20] Questa espressione è stata derivata da Kim e Williams e prende in considerazione gli effetti della variazione di densità:

$$\chi = a \frac{3 \left(\sqrt{\frac{\rho_{\infty}}{\rho}} + 1 \right)^2}{4\pi \left(2 \cdot \sqrt{\frac{\rho_{\infty}}{\rho}} + 1 \right)} e^{\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2\}}$$

La variabile a corrisponde allo “*strain rate*”, ρ_{∞} è la densità nella corrente ossidante mentre erfc^{-1} è l’inverso della funzione di errore complementare. Per le geometria in controcorrente il disturbo sulla flamelet (*strain rate*) può essere posto in relazione alla *scalar dissipation* in corrispondenza della zona dove la frazione di miscela è stechiometrica per mezzo della seguente espressione:

$$a = \frac{\chi_{st} \cdot \pi}{e^{\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z_{st})]^2\}}}$$

Quindi in conclusione, la distribuzione della *scalar dissipation* è univocamente determinata dalla frazione di miscela Z , dal valore stechiometrico di χ e dalla distribuzione di densità.

Fisicamente, non appena si considera un disturbo sulla *flamelet*, la lunghezza della zona di reazione tende a diminuire mentre il gradiente della frazione di miscela in corrispondenza della posizione stechiometrica $Z = Z_{st}$ tende a crescere.

Il valore istantaneo della *scalar dissipation* stechiometrica χ_{st} , viene utilizzato come parametro di non equilibrio. Nella situazione limite in cui vale $\chi_{st} = 0$ la chimica tende all’equilibrio e al crescere di χ_{st} ad esempio a causa di un disturbo aerodinamico si accresce anche la condizione di non equilibrio. Possono verificarsi spegnimenti locali della *flamelet* quando χ_{st} supera ben determinati valori critici. In tal caso si ha l’esatto comportamento descritto fisicamente dalla parte superiore della curva ad S di Peters vista in figura 3.1.

Dalle equazioni delle Flamelet viste a pagina 56 i termini non stazionari vengono trascurati e nel modello si assume che la struttura locale di fiamma sia esclusivamente controllata dal bilancio fra le reazioni chimiche stazionarie ed i processi stazionari di diffusione. Si ottiene la seguente semplificazione:

$$0 = \frac{\chi}{2} \cdot \frac{1}{Le_k} \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} \right) + \frac{\omega_k}{\rho}$$

$$0 = \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 h}{\partial Z^2} \right) - \sum_{k=1}^N h_k \left\{ \frac{\chi}{2} \left(\frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} \right) + \frac{\omega_k}{\rho} \right\}$$

Queste sono le equazioni che formano le basi dello *Steady Laminar Flamelet Model* (SLFM)[9].

Con l’integrazione numerica delle equazioni proposte si otterrà fissato il valore di χ e per ogni valore della frazione di miscela il valore delle frazioni in massa di tutte le specie e la temperatura, ovvero tutte le grandezze scalari derivanti dal calcolo chimico di combustione. In questo modo tutte le informazioni relative alla chimica del sistema potranno essere stoccate in apposite *look-up table* ed utilizzate sulle geometrie di calcolo del problema in esame. Nell’ottenimento delle equazioni di campo si ottiene la distribuzione della frazione di miscela e la varianza della frazione di miscela mentre con l’integrazione delle *Flamelet* è possibile attribuire ad ogni valore di Z (ad una specifica χ) l’entità di tutti gli scalari di combustione. Basterà perciò risolvere le equazioni di campo e

interrogare le look-up tables stoccate per leggere direttamente i risultati di combustione proposti dal modello Flamelet [22]. La realizzazione della *look-up table*, nel caso più semplice coinvolge il legame, ad un dato valore di χ , fra Z , la varianza di Z ed uno scalare (temperatura, frazione in massa di una specie) come rappresentato nell'immagine sottostante:

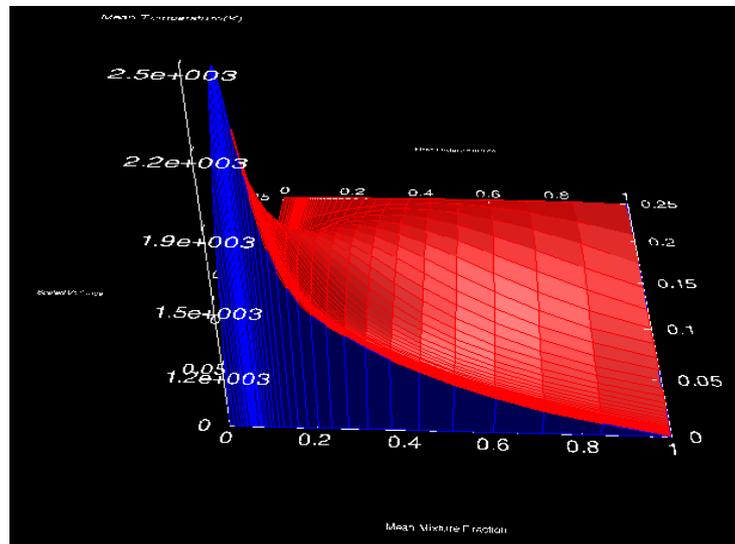


Fig 4.6

E' perciò presente una *look-up table* per ogni scalare risultante dalla combustione ed essa viene costruita tenendo conto dell'influenza della turbolenza sulla combustione attraverso la funzione densità di probabilità $p(Z)$ che determina l'andamento tridimensionale della distribuzione dei punti scalari sul grafico. Normalmente viene utilizzata, come *Probability Density Function* una presunta β -function.

Nei casi in cui si voglia tenere in considerazione la variazione locale della *scalar dissipation* all'interno della fiamma tridimensionale turbolenta è possibile vedere la fiamma tridimensionale come composta da tanti tipologie di *Flamelet* a chimica diversa calcolata con valore via via crescente della *scalar dissipation*. Laddove la combustione accentua il fenomeno dello strain rate questo sarà implementato dal modello posizionando in quel punto una chimica di combustione fortemente disturbata dalla turbolenza e viceversa laddove la combustione si avvicina all'equilibrio verrà interpretata la presenza di una *flamelet* a *scalar dissipation* nulla. La suddivisione di *flamelets* multiple viene fatta nel calcolo di *pre-processing* delle *flamelets* descritto, integrando più volte le *flamelet equations* al crescere del valore di χ . L'algoritmo che porta all'aumento della scalar dissipation nel corso dell'integrazione segue una legge del seguente tipo:

$$\chi_i = \begin{cases} 10\chi_{i-1} & \text{per } \chi_{i-1} < 1[1/s] \\ \chi_{i-1} + \Delta\chi & \text{per } \chi_{i-1} \geq 1[1/s] \end{cases}$$

Anche in questo caso si procederà, come detto in precedenza , alla successiva generazione delle look-up tables per provvedere allo stoccaggio dei dati capaci di rappresentare la chimica della combustione con la differenza che aumenteranno, nel caso delle *multiple flamelets* le informazioni da stoccare.

4.2.3 – Modello di combustione all'equilibrio

Il modello all'equilibrio risulta un modello più semplice rispetto al *flamelet*. L'assunzione semplificativa alla base del modello considera che la chimica possa essere infinitamente veloce e la struttura locale della fiamma risulta completamente determinata dalla sola frazione di miscela. Le frazioni in massa delle specie, mediate secondo Favre, sono calcolate per mezzo di una equazione del tipo:

$$\bar{Y}_k = \int_0^1 Y_k(Z) \cdot p(Z) dZ$$

La distribuzione delle frazioni in massa delle diverse specie laminari Y_k è determinata dalle soluzioni di Burke-Shumann o dalle soluzioni della chimica all'equilibrio. In questo modo, l'influenza della turbolenza sulla combustione è molto limitata e la sua presenza compare solo attraverso la funzione densità di probabilità $p(Z)$. Nelle applicazioni ingegneristiche non si cerca la *Probability Density Function* più adatta al caso in esame, perché questo richiederebbe sforzi computazionali elevati, ma si presume invece di essere a conoscenza del tipo di PDF utilizzando una funzione univoca, sufficientemente versatile e plasmabile per mezzo di coefficienti che viene denominata "PDF presunta". Nel caso del modello all'equilibrio è utilizzata la β -function.

La forma della β -function dipende esclusivamente da due parametri: frazione di miscela e varianza della frazione di miscela ed ha quindi la seguente forma

$$P(Z) = Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1} \cdot \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha) \cdot \Gamma(\beta)}$$

dove Γ è la funzione gamma ed i coefficienti α , β e γ si calcolano dalle seguenti espressioni:

$$\alpha = \tilde{Z} \cdot \gamma \quad \beta = (1 - \tilde{Z}) \cdot \gamma \quad \beta = \frac{(1-\tilde{Z}) \cdot \tilde{Z}}{\tilde{Z}^2} - 1$$

La β -function è una funzione veramente molto malleabile e può assumere forme completamente differenti al variare dei parametri γ e Z [9].

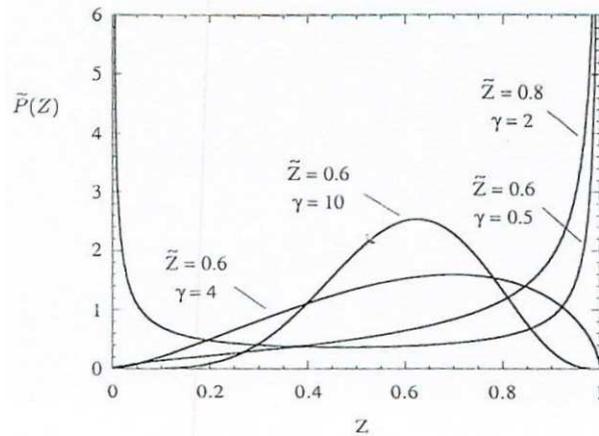


Fig 4.7

Per valori relativamente piccoli della varianza della frazione di miscela e conseguenti alti valori di γ la β -function assume distribuzioni a campana approssimandosi alla distribuzione di Gauss.

Per $\alpha < 1$ nasce una singolarità in corrispondenza di $Z = 0$ mentre per $\beta < 1$ la singolarità si sposta ai limiti del dominio della frazione di miscela.

L'intervallo di applicabilità di questi modelli è chiaramente ristretto alle fiamme controllate dal miscelamento dove i numeri di Damkohler sono alti in ogni punto e dove cioè la chimica viene considerata infinitamente veloce. La limitazione di applicabilità in regimi controllati dal miscelamento si nota nel momento in cui si vogliono predire le distribuzioni di specie minori coinvolte in reazioni a chimica lenta (come le emissioni inquinanti CO ed NO_x) oppure nel tentativo di predire l'estinzione di fiamma, casi nei quali il modello fallisce.

La mancanza è grave in quanto la predizione delle emissioni inquinanti è diventata un obiettivo primario dell'analisi di combustione da quando sono state introdotte severe limitazioni a tali emissioni.

In conclusione, i modelli all'equilibrio a scalare conservato possono essere utilizzati per simulazioni di prima approssimazione per utilizzarne le soluzioni come punto di partenza per simulazioni della fiamma più realistiche [9].

4.2.4 – Unsteady Flamelet model

Il modello *Unsteady Flamelet* rappresenta una estensione dello *Steady Laminar Flamelet Model* appositamente realizzato per la determinazione delle principali emissioni inquinanti caratterizzate da un tempo di formazione relativamente più lento rispetto allo sviluppo della chimica di combustione. All'interno dei bruciatori si sviluppano infatti diversi fenomeni seguendo tempi anche sostanzialmente diversi [23]; si pensi al diverso tempo richiesto dalle reazioni di combustione per completare l'ossidazione dei reagenti rispetto al tempo di frazionamento dei vortici. Si è visto che questi fenomeni sono governati da scale di tempo differenti e anche variabili caso per caso in funzione delle caratteristiche della geometria in esame e del tipo di combustione. Ora, in aggiunta a questo, all'interno dei processi di reazione stessi la formazione di specie inquinanti come gli NO_x procede con una velocità sensibilmente più lenta rispetto alle altre reazioni e le particelle reagenti non hanno la capacità di adattarsi rapidamente alle condizioni locali di combustione e di turbolenza incontrate. Questa mancanza di tempo, impedisce un veloce adattamento delle particelle in

combustione alle sempre nuove condizioni incontrate durante il movimento dall'ingresso all'uscita del bruciatore e questo determina un mutuo mutamento delle locali condizioni al contorno. Le particelle influenzeranno il campo di moto in combustione e il campo di moto influenzerà il tasso di formazione dell'inquinante.

Il modello *Steady Laminar Flamelet* non tiene conto di questi effetti. E' infatti un modello adatto a stimare la presenza di fiamma nelle varie posizioni locali del dominio ma non è studiato per seguire il percorso di una particella in lenta reazione chimica.

Per questo problema il modello *Flamelet* viene affiancato dall'*Unsteady Flamelet model*.

In questo modello le diverse particelle fluide vengono identificate con delle *flamelets* ed il sistema segue l'evolversi temporale delle condizioni attraversate dalle diverse *flamelet* nell'attraversamento del campo di moto. Ogni *flamelet* attraverserà il campo di moto seguendo percorsi statisticamente diversi ed ognuna incontrerà condizioni localmente variabili del valore di *scalar dissipation*. Il legame in questo sta nel fatto che se il tasso di *scalar dissipation* rappresenta l'effetto del campo di moto e del miscelamento all'interno delle equazioni delle *flamelet*, man mano che χ varia lungo il percorso di ogni *flamelet* si potrà tenere conto nelle equazioni dell'influenza di queste variazioni permettendo di cogliere anche i processi inquinanti di formazione più lenti che interverranno man mano che ogni *flamelet* si porta verso la fine del suo singolo percorso.

Per tener traccia del tempo trascorso man mano che una *flamelet* si sposta dall'ingresso in camera si utilizza una relazione del tipo[25][26]:

$$t = \int_0^x \frac{1}{u(x')|(\tilde{Z} = Z_{st})}$$

Dove \tilde{Z} rappresenta la media di Favre del valore di frazione di miscela mentre $u(z')|(\tilde{Z} = Z_{st})$ è il valore della componente assiale della velocità in corrispondenza della posizione radiale in cui vale $(\tilde{Z} = Z_{st})$.

Tenendo conto di questo aggiornamento temporale tutte le equazioni delle *flamelet* saranno risolte dal sistema al valore assunto puntualmente della *scalar dissipation* in modo da differenziare il risultato rispetto a quello ottenuto dal solo *SLF Model*. Ovviamente, l'utilizzo del modello *unsteady flamelet* richiede l'implementazione di una simulazione non-stazionaria che sarà studiato in modo che il tempo totale di attraversamento del combustore dalle varie particelle *Flamelet* possa essere suddiviso in un sufficiente numero di *time-steps* per ognuno dei quali risolvere le equazioni delle *Flamelet* al valore corrente della *scalar dissipation* χ .

Al fine di conoscere la posizione di ogni particella *flamelet* nel corso delle simulazioni all'interno del dominio fluido il modello *unsteady flamelet* tiene conto di una equazione definita come *marker equation* nella quale il percorso di ogni particella è individuato seguendo il "tracciante" della frazione pesata in massa di ogni *flamelet*. Se la *flamelet* i-esima è individuata tramite l'indice j si otterrà la soluzione della seguente equazione [24]:

$\tilde{I}_j =$ Frazione in massa della particella (*flamelet*) j -esima rispetto al totale delle particelle considerate in movimento

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{I}_j}{\partial t} + \nabla(\tilde{\rho} \tilde{I}_j \tilde{\mathbf{v}}) - \nabla \left(\tilde{\rho} \frac{v_T}{Sc_j} \nabla \tilde{I}_j \right) = 0$$

In cui ρ individua la densità, \tilde{v} rappresenta la media dell'insieme di tutti i vettori, ν_T è la viscosità turbolenta e Sc_j è il numero di Schmidt turbolento.

5 DESCRIZIONE DEI DOMINI GEOMETRICI ANALIZZATI

5.1 Camera sperimentale di laboratorio

5.1.1 – Descrizione

La geometria oggetto delle simulazioni numeriche è quella di un combustore verticale dalla linea abbastanza semplice ed essenziale (Vedi Fig 5.1 e Fig 5.2). Esso si compone principalmente di tre parti: i condotti di ingresso dei reagenti, una camera di combustione e un camino sommitale per l'espulsione dei prodotti di combustione [29].

La parte della geometria più importante per lo studio numerico, è la camera di combustione. Essa presenta una sezione quadrata di lati pari a 85 mm ed una altezza utile, prima dell'ingresso a camino, di 114 mm.

Il combustibile viene immesso nel combustore per mezzo di un accesso anulare posto a centro camera. La corona circolare giace sulla base della camera è le due circonferenze che la descrivono hanno diametri rispettivamente pari a 10 mm (interno) e 14 mm (esterno) mentre l'area della sezione anulare è pari a $75,4 \text{ mm}^2$. Prima di giungere a tale ingresso, il combustibile attraversa uno *swirler* assiale a 45° che conferisce al fluido una componente di moto tangenziale.

L'aria entra invece in camera coassialmente all'ingresso del combustibile attraverso una corona circolare di diametri rispettivamente pari a 16 mm e 30 mm che racchiudono un'area di $505,8 \text{ mm}^2$. L'ossidante, prima dell'accesso in camera, viene spinto da un ventilatore in un misuratore di portata e converge ortogonalmente alla direzione assiale in un "plenum" dove l'aria ruota di 90° e percorre un tratto esternamente al condotto centrale del combustibile dove la turbolenza della rotazione viene in parte smorzata e la portata si distribuisce equamente in direzione assiale. A valle del "plenum", l'aria entra in uno *swirler* radiale a pale regolabili che conferiscono alla corrente una componente tangenziale aggiuntiva e ruotando nuovamente si riporta in direzione assiale alla base del combustore all'attraversamento della sezione anulare di accesso descritta.

I percorsi di aria e combustibile sono perciò distinti fino all'ingresso dei reagenti nella zona di reazione generando le condizioni per lo sviluppo di una combustione non – premiscelata. Le componenti tangenziali di velocità imposte dagli *swirlers* e i cambiamenti di direzione descritti conferiscono ai reagenti la turbolenza necessaria ad assicurare un adeguato intimo miscelamento nella zona di reazione.



Fig 5.1

La camera di combustione vera e propria è delimitata, oltre che dalla base, da quattro pareti piane. Tre di esse sono realizzate in metallo mentre la quarta è costruita in una lega al quarzo trasparente per alte temperature per consentire la visione di fiamma e le misurazioni sperimentali PIV.

Una delle pareti in metallo presenta i fori e gli accessi necessari per l'inserimento delle sonde di misurazione puntuale di velocità: in particolare l'accesso per le misure di velocità è possibile a quattro diverse altezze ortogonali all'asse della camera poste ad una distanza dalla base di 3 mm, 20 mm, 55 mm e 95 mm dalla base della camera.

Sono inoltre disponibili tre punti di accesso per le misure di temperatura (vedi Fig 5.1) in corrispondenza di tre traverse poste rispettivamente a 15 mm, 55 mm e 95 mm dalla base della camera.

Infine, a valle della fiamma, l'uscita dei gas di scarico è posta nella parte alta. Si ha una prima parte conica di raccordo fra la camera a sezione quadrata ed il camino cilindrico (vedi Fig 5.2)

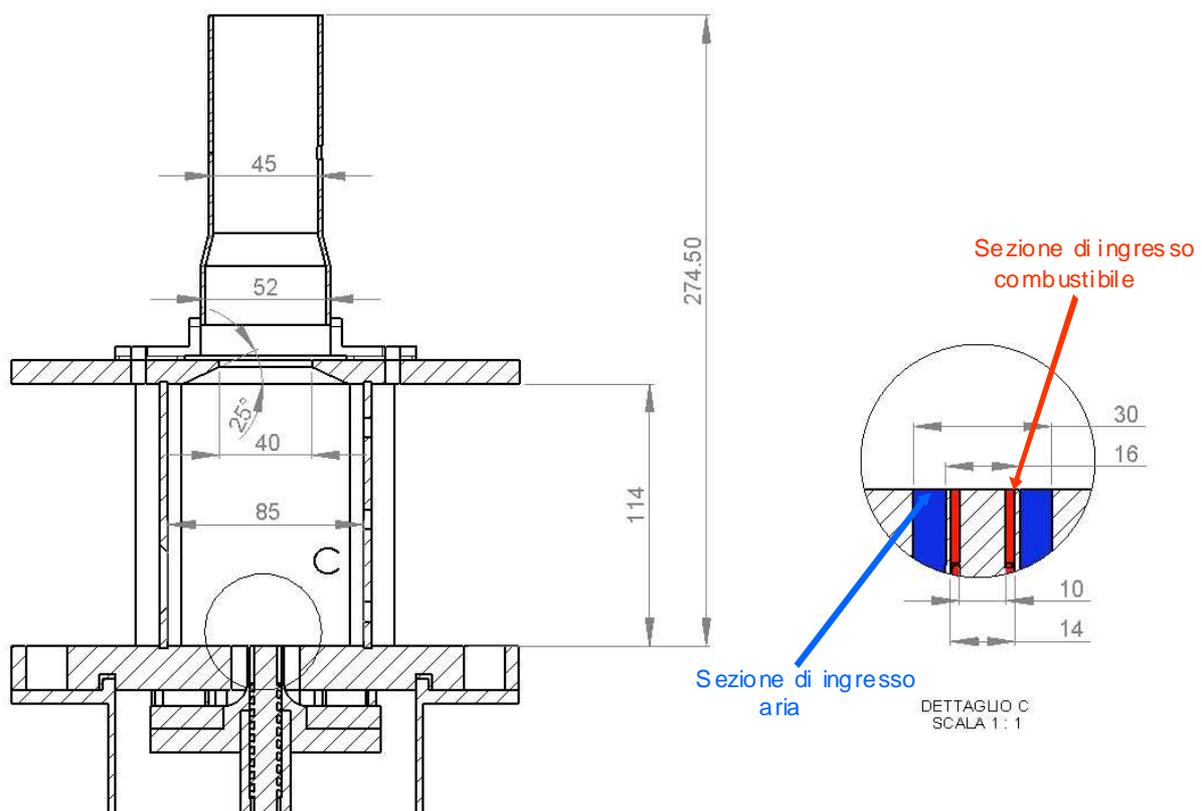


Fig 5.2

La parte più stretta del cono misura 40 mm ed attraverso di essa i fumi accedono ad un camino cilindrico del diametro di 52 mm che va successivamente riducendosi a 45 mm. Qui, prima dell'espulsione dei prodotti di combustione, sono previsti gli accessi necessari per l'inserimento di strumenti di misurazione della concentrazione delle specie e di analisi dei fumi di scarico.

La camera di combustione sperimentale descritta è installata, per la conduzione delle prove sperimentali, presso l'Università di Trieste dove sono stoccati anche diversi combustibili in bombole per la diversificazione e il confronto fra fiamme al variare dell'alimentazione.

5.1.2 – Realizzazione della griglia di calcolo

La prima necessità, per l'esecuzione di una analisi CFD del combustore sperimentale, è stata la realizzazione di un modello geometrico della camera, comprensiva di ingressi dei reagenti, zona di combustione e camino di espulsione fumi. Dallo studio delle immagini, con l'aiuto di misurazioni sulle dimensioni e dalle quote a disposizione è stato realizzato il modello tridimensionale del dominio fluido. Ovviamente tutte le pareti esterne e le parti non interessate dalla presenza di fluidi non sono state considerate nel modello. Una immagine del volume da analizzare è rappresentata nella seguente Figura 5.3 nella quale è riportato un ingrandimento del particolare sistema di adduzione di combustibile e comburente a valle dei rispettivi *swirler*.

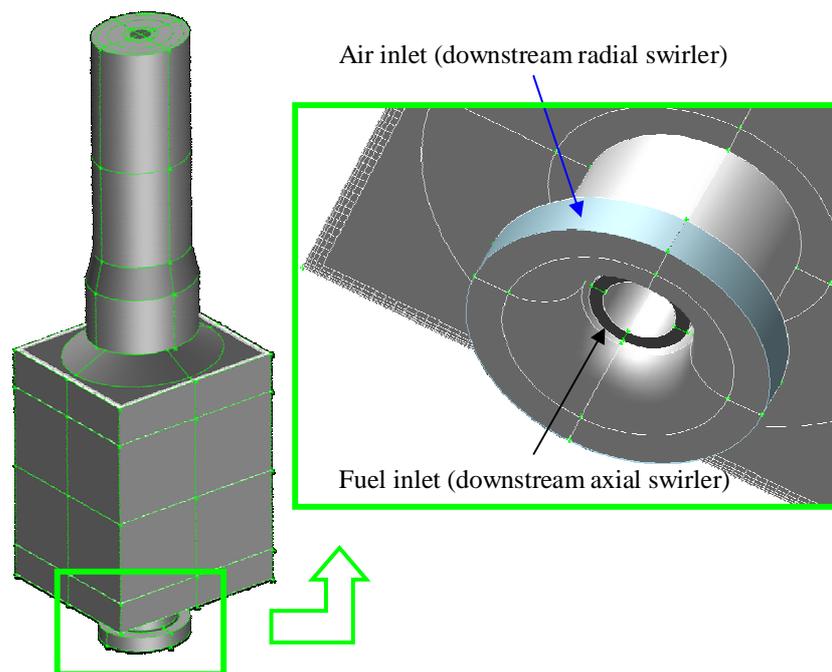


Fig 5.3

A geometria ultimata si è proceduti con la realizzazione della griglia di calcolo, ovvero la suddivisione dell'intero volume fluido in esame in celle esaedriche o tetraedriche elementari all'interno delle quali il codice CFD possa successivamente implementare le equazioni di governo. E' stata costruita una prima griglia di calcolo che è stata successivamente migliorata a seguito di alcune prime simulazioni. Esse, oltre a permettere la correzione di alcuni errori della *mesh*, hanno permesso di capire quali zone necessitassero di una griglia più densa e per quali volumi fosse sufficiente un minor numero di celle. In particolare le correzioni maggiormente significative sono state le seguenti:

- **L' Eliminazione del camino della camera di combustione:** Le prime simulazioni di prova sulla geometria tridimensionale completa di camino hanno permesso di evidenziare eventuali fenomeni di tiraggio. Si è visto che l'assenza del camino stesso non portava ad apprezzabili cambiamenti nel campo di moto fluido, essendo sempre la pressione in camera prossima alla pressione atmosferica. L'eliminazione del camino ha permesso di alleggerire considerevolmente la *mesh* dando modo di incrementare l'infittimento della griglia di calcolo in altri punti del dominio fluido più sensibili allo sviluppo della combustione. Viste le esigue dimensioni della

camera è quindi del tutto plausibile che l'assenza del camino non comporti errori apprezzabili sulle simulazioni.

- **Infittimenti della griglia.** Si è optato per realizzare infittimenti di griglia principalmente in due zone. La prima riguarda il volume fluido dove combustibile e comburente, uscendo dai rispettivi condotti di adduzione, perfezionano il loro miscelamento. L'infittimento è stato realizzato a seguito di alcune simulazioni a freddo di miscelamento dei reagenti (reazioni di combustione disattivate). Si è visto infatti che i risultati di velocità del fluido all'ingresso in camera, a parità di modello di turbolenza scelto, risultavano più precisi in relazione ai dati sperimentali. La seconda zona interessata da un notevole infittimento è stata quella a valle dello *swirler* dell'aria, dove il condotto dell'aria subisce un cambio di direzione a 90° prima di entrare assialmente in camera. Questo per assicurarsi di simulare correttamente l'ingresso dei reagenti ed escludere errori a monte della zona di interesse.

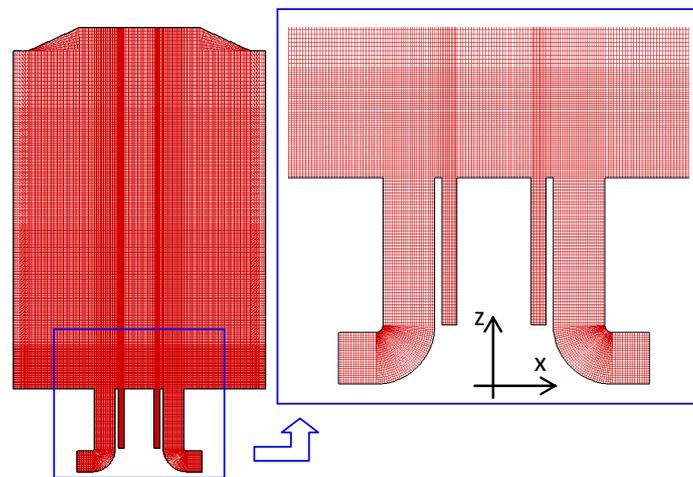


Fig 5.4

- **Modifiche per l'affinamento della mesh:** sono stati apportati altri successivi miglioramenti alla griglia allo scopo di affinare il calcolo e correggere alcuni difetti a celle che presentavano angoli eccessivamente acuti nella parte conica di uscita a camino. Infine è stato realizzato un maggiore infittimento in prossimità di tutte le pareti della camera a sezione quadrata (*boundary layers*) al fine di aumentare la sensibilità del calcolo numerico in prossimità delle pareti.

La griglia di calcolo finale, ottenuta dopo tutte le modifiche indicate è rappresentata nella successiva figura 5.5. Tale grigliatura è stata realizzata con il "meshatore" commerciale GAMBIT estraendo, a lavoro ultimato, il file *mesh* di interscambio adatto all'importazione della griglia nel codice FLUENT 6.3 utilizzato per le simulazioni. La mesh risultante possiede circa 2,6 milioni di celle strutturate esaedriche ad esclusione del condotto di ingresso del combustibile che, per la sua forma cilindrica è stato discretizzato con l'uso di celle tetraedriche.

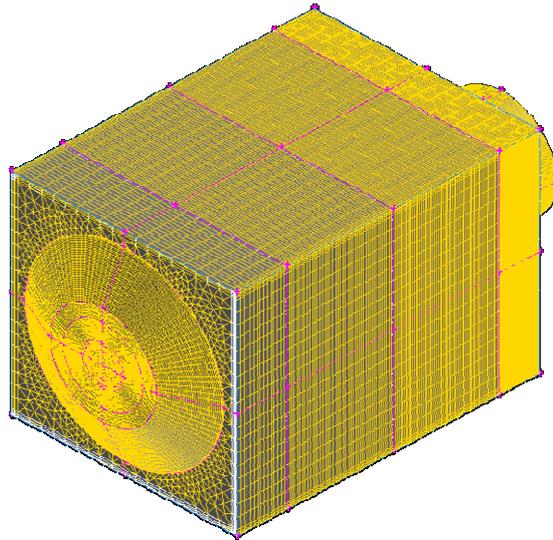


Fig 5.5

5.1.3 – Determinazione delle condizioni al contorno

Qualsiasi codice di calcolo fluidodinamico, come FLUENT 6.3, richiede nell'ordine un dominio computazionale discretizzato in un insieme di celle elementari e l'imposizione di una serie di condizioni essenziali per definire la natura e le caratteristiche dei fluidi, le condizioni di ingresso nel dominio e le modalità di uscita da esso. Oltre a queste caratteristiche macroscopiche è possibile inserire una vasta gamma di informazioni che permettono di diversificare la maggioranza dei problemi che si ha necessità di risolvere con un codice numerico. Nel seguito verranno descritte le principali condizioni al contorno che sono state inserite nel codice FLUENT per riprodurre computazionalmente la combustione realizzata sperimentalmente nel combustore di laboratorio [29].

Le prove sperimentali si dividono in due serie di prove distinte [30]:

- La prima serie di prove è condotta inviando in camera di combustione una **portata di aria pari a 150 [Slpm]** a cui sarà associata una portata nota di combustibile. Quest'ultima è infatti calcolabile imponendo il rapporto di miscela e conoscendo il tipo di combustibile che si vuole inviare a bruciare. I combustibili considerati nelle prove sperimentali sono Propano e Syngas.
- La seconda serie di prove sperimentali riguarda invece l'utilizzo di una **portata di aria pari a 250 [Slpm]** che, con l'imposizione del rapporto di equivalenza e gli stessi combustibili visti al punto precedente, si miscela con portate note di ciascun tipo di combustibile.

Da quanto detto si ottiene che note le portate di aria si invieranno in camera portate di combustibile tali da assicurare, mediamente, un rapporto di equivalenza costante.

- Il rapporto di equivalenza, per le prove sperimentali è stato fissato pari a:

$$\phi = 0,5$$

Da cui semplici calcoli forniscono le portate di reagenti da inviare in camera:

- **Caso 1 – Prove a 150 [Slpm]**

Portata di aria inviata in camera:

$$\dot{m}_{air} = 150[Slpm] = 0,002959 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Portata di combustibile inviata in camera:

$$Syngas \rightarrow \begin{cases} \phi = 0,5 \\ \lambda_{st} = 2,787 \left[\frac{kg_{air}}{kg_{fuel}} \right] \end{cases} \rightarrow \phi = \frac{1/\lambda}{(1/\lambda)_{st}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)_{st}}$$

$$\dot{m}_{fuel} = \phi \cdot \left(\frac{1}{\lambda} \right)_{st} \cdot \dot{m}_{air} = 0,5 \cdot \frac{1}{2,787} \cdot 0,002959 = 0,0005309 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

$$Propano \rightarrow \begin{cases} \phi = 0,5 \\ \lambda_{st} = 15,74 \left[\frac{kg_{air}}{kg_{fuel}} \right] \end{cases} \rightarrow \phi = \frac{1/\lambda}{(1/\lambda)_{st}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)_{st}}$$

$$\dot{m}_{fuel} = \phi \cdot \left(\frac{1}{\lambda} \right)_{st} \cdot \dot{m}_{air} = 0,5 \cdot \frac{1}{15,74} \cdot 0,002959 = 0,000094 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

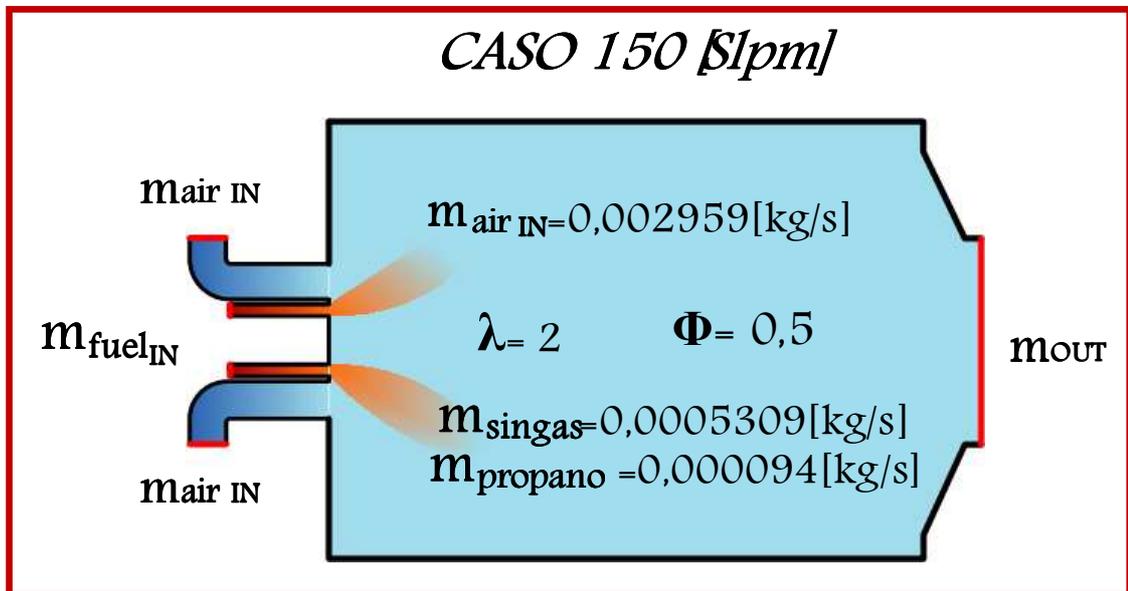


Fig 5.6

- **Caso 2 – Prove a 250 [Slpm]**

Portata di aria inviata in camera:

$$\dot{m}_{air} = 250[\text{Slpm}] = 0,004936 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]$$

Portata di combustibile inviata in camera:

$$\text{Syngas} \rightarrow \begin{cases} \phi = 0,5 \\ \lambda_{st} = 2,787 \left[\frac{\text{kg}_{air}}{\text{kg}_{fuel}} \right] \end{cases} \rightarrow \phi = \frac{1/\lambda}{(1/\lambda)_{st}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)_{st}}$$

$$\dot{m}_{fuel} = \phi \cdot \left(\frac{1}{\lambda} \right)_{st} \cdot \dot{m}_{air} = 0,5 \cdot \frac{1}{2,787} \cdot 0,004936 = 0,000882 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]$$

$$\text{Propano} \rightarrow \begin{cases} \phi = 0,5 \\ \lambda_{st} = 15,74 \left[\frac{\text{kg}_{air}}{\text{kg}_{fuel}} \right] \end{cases} \rightarrow \phi = \frac{1/\lambda}{(1/\lambda)_{st}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)_{st}}$$

$$\dot{m}_{fuel} = \phi \cdot \left(\frac{1}{\lambda} \right)_{st} \cdot \dot{m}_{air} = 0,5 \cdot \frac{1}{15,74} \cdot 0,004936 = 0,000156 \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]$$

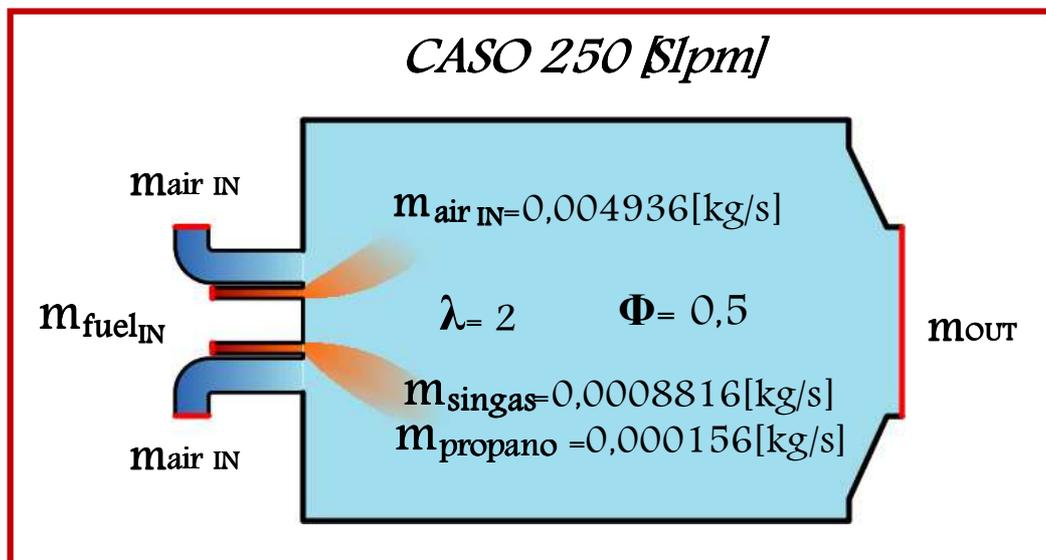


Fig 5.7

Per completezza si riporta una tabella riassuntiva delle portate in massa considerate nelle simulazioni (Vedi Tab 5.1):

CASO	REAGENTI	PORTATA IN MASSA	U.M.
150 [Slpm]	Aria	0,002959	[kg/s]
	Syngas	0,0005309	[kg/s]
	Propano	0,000094	[kg/s]
250 [Slpm]	Aria	0,004936	[kg/s]
	Syngas	0,0008816	[kg/s]
	Propano	0,000156	[kg/s]

Tab 5.1

Dalla conoscenza delle portate in massa e delle aree di passaggio dei condotti di ingresso è stato possibile determinare le velocità di ingresso suddivise nelle componenti di velocità imposte dagli *swirls*. Le *boundary conditions* di velocità di ingresso sono state inserite nella sezione a valle degli *swirls* in modo tale che le diverse componenti rappresentassero correttamente l'effetto tangenziale imposto dalle pale. Una serie di prove preliminari ha permesso di constatare che con un'angolo di swirl pari a 61° si ottenevano i corretti profili di velocità dell'aria in camera, coincidenti con quelli misurati sperimentalmente. Con tale angolo di swirl le *boundary conditions* imposte sono riportate nelle tabelle seguenti (Vedi Tab 5.2) [12]:

CASO	CARATTERISTICHE	VALORE NUMERICO	U.M.
150 [Slpm]	Velocità Assiale	0	[m/s]
	Velocità Tangenziale	1,804	[m/s]
	Velocità Radiale	-1	[m/s]
	Diametro idraulico aria	0,014	[m]
	Diametro idraulico fuel	0,004	[m]
	Temperatura ingresso	310	[K]
150 [Slpm]	Velocità Assiale	0	[m/s]
	Velocità Tangenziale	1,8518	[m/s]
	Velocità Radiale	-1	[m/s]
	Diametro idraulico aria	0,014	[m]
	Diametro idraulico fuel	0,004	[m]
	Temperatura ingresso	310	[K]

Tab 5.2

Non ultima, è stata inserita nel codice la composizione del combustibile. Nel caso del propano è stato simulato l'utilizzo di propano puro, presente nel *database* di FLUENT, mentre per quanto riguarda il singas è stata realizzata appositamente una miscela di diversi composti chimici in base all'analisi dei componenti della miscela utilizzata nelle sperimentazioni. Si riporta nella successiva Tabella 5.3 la composizione del gas da pirolisi utilizzata nelle simulazioni:

COMPONENTI SYNGAS	% IN VOLUME	FRAZIONE IN MASSA
CH4	21%	0,113
H2	7%	0,0047
CO2	38%	0,562
CO	29%	0,273
N2	5%	0,0473

Tab 5.3

5.2 Combustore della MTG sperimentale Elliot 80

5.2.1 – Descrizione della prima geometria (MTG1) e della griglia di calcolo

La micro turbina a gas sperimentale installata a scopo di ricerca presso l'università di Perugia è equipaggiata da una camera di combustione oggetto delle successive simulazioni di combustione.

La camera di combustione in oggetto, è una camera di combustione del tipo ricco-povero RQL (*Rich-burn, Quick-mix, Lean-burn*) costituita da due stadi di combustione ed uno stadio finale di diluizione dei gas caldi prima dell'ingresso in turbina evidenziati nella successiva Figura 5.8.

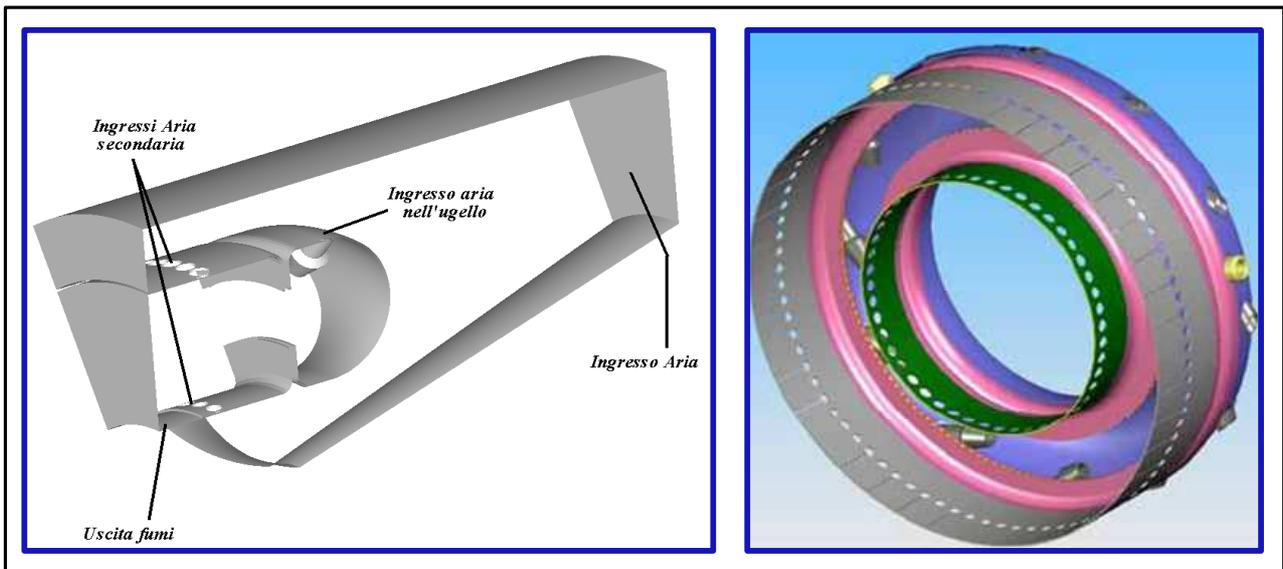


Fig 5.8

Nella prima camera del *liner* ha luogo una combustione nella quale, se la miscela molto ricca e ad alta temperatura viene correttamente miscelata non va a formare emissioni di NOx a causa della scarsa presenza di ossigeno. Nella passaggio fra la prima e la seconda camera viene completata l'ossidazione del combustibile grazie all'introduzione di comburente attraverso la gola di divisione delle camere stesse. Questa introduzione di comburente porta il regime di combustione a diventare magro in tempi molto rapidi e con abbassamenti di temperatura che, se ben controllati portano a formazioni contenute di NOx (molto ossigeno ma basse temperature). A combustione ultimata si ha l'ulteriore diluizione dei gas combusti con l'aria entrante nella parte terminale del *liner* attraverso i fori di diluizione. Questa aria ha il principale scopo di ridurre la temperatura di ingresso in turbina limitandola a valori supportabili dalla girante.

Anche per questa camera di combustione, nell'ambito dello stesso progetto di ricerca, si è interessati ad approfondire l'analisi della combustione utilizzando gas di sintesi a basso potere calorifico introdotti in questo caso a bruciare, a differenza della camera da laboratorio, in una geometria più complessa, e in una macchina più vicina alle reali applicazioni ingegneristiche.

Dell'intera camera di combustione si è deciso di modellare un solo settore anulare (Vedi Fig 5.8 a sinistra) pari ad un dodicesimo della camera anulare totale visibile in Fig 5.8 sulla destra [27] [28]. Questo grazie alla simmetria polare dei dodici settori considerati. Il settore di camera è stato disegnato utilizzando il software GAMBIT, con il quale è stato poi discretizzato il volume fluido in

celle prevalentemente strutturate, fatta eccezione per il *liner* e per gli ugelli di ingresso del combustibile, che hanno richiesto celle tetraedriche a causa della loro più complicata conformazione. La *mesh* realizzata comprende circa 700 000 celle e possiede settaggi di “*link*” delle proprietà fluide su tutte le facce di contorno adiacenti alla parte mancante (non simulata) della camera. Si riportano il disegno geometrico del settore modellato e il dominio fluido discretizzato nella successiva Fig 5.9:

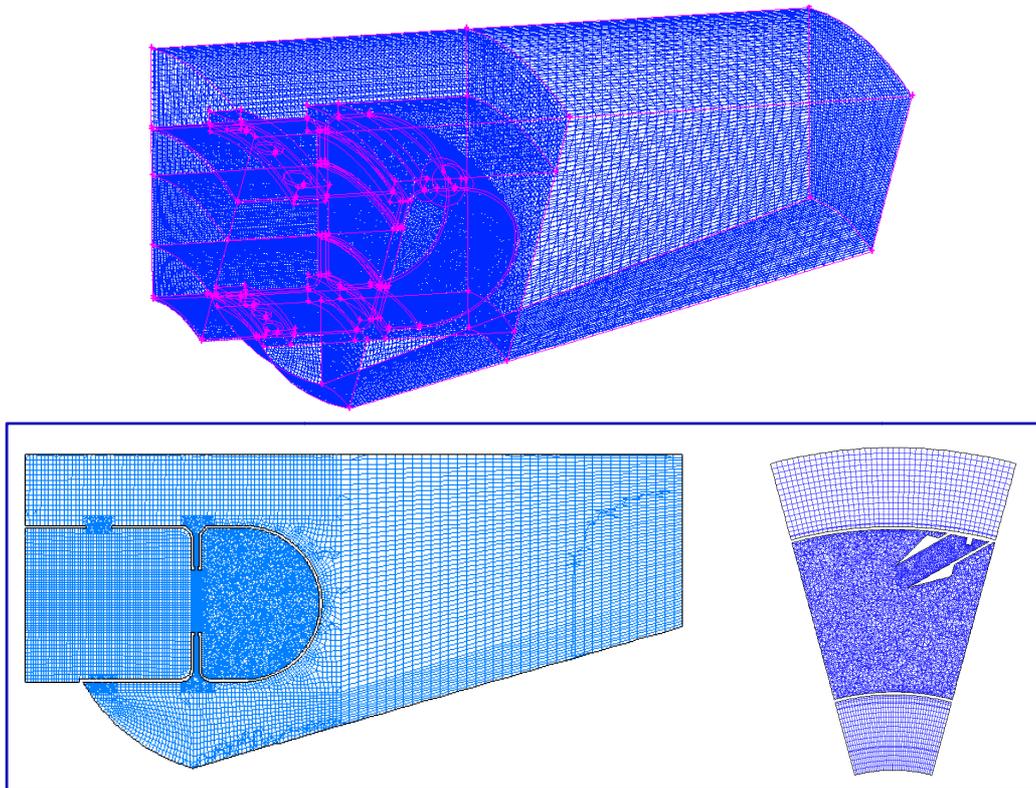


Fig 5.9

5.2.2 – Determinazione delle condizioni al contorno

Vengono ora esaminate le condizioni al contorno imposte sulla geometria discretizzata del bruciatore. Dal calcolo delle *boundary conditions*, ed in particolare dalle portate in massa di combustibile e ossidante, dipendono il regime di combustione generato all'interno del *liner* e le caratteristiche campo di moto che si instaura nell'intera camera anulare. A differenza delle fiamme premiscelate più semplici, dove si introduce in un unico *step* l'intera portata dei reagenti, nel caso della microturbina si ha una prima combustione non-premiscelata, nel *liner*, fra la totalità del combustibile e una parte di aria, per poi ultimare l'introduzione dell'aria secondaria in due *steps* successivi attraverso i fori di ingresso dell'aria secondaria posti a valle della camera primaria e per mezzo dei fori di diluizione situati prima dell'ingresso in turbina. Si ha quindi una maggiore complicazione del regime di combustione che vede il susseguirsi di una combustione ricca nella prima camera e una combustione magra nella seconda. Le *boundary conditions* sono state ottenute seguendo i seguenti ragionamenti [27] [28]:

- Come primo approccio allo studio, sono state intraprese prove sperimentali e simulazioni considerando un valore nominale costante dei rapporti di equivalenza ϕ delle due camere, ricca e povera, che dividono il *liner*. I valori nominali di progetto di ϕ sono i seguenti:

Camera primaria $\rightarrow \phi = 2$

Camera secondaria $\rightarrow \phi = 0,5$

Si noti che questo valore del rapporto di equivalenza deve essere mantenuto costante per qualunque tipo di combustibile utilizzato in camera. In particolare al variare del rapporto stechiometrico dei diversi combustibili occorrerà regolare le portate in massa effettive di combustibile e comburente fino ad assicurare i corretti valori di ϕ .

- I combustibili utilizzabili sperimentalmente per l'alimentazione della MTG sono stati il gas naturale ed il singas derivante da biomasse. Anche nelle simulazioni numeriche sono pertanto stati considerati esclusivamente questi due tipi di alimentazione.
- Si noti che le boundary conditions risultano essere variabili al variare delle condizioni di carico della MTG. Nelle condizioni di *off-design* le MTG prevedono infatti una regolazione della velocità di rotazione dell'albero di collegamento compressore - turbina. La regolazione sulla velocità di rotazione permette, al calare del carico, di diminuire l'aria aspirata dal compressore e contemporaneamente la portata di combustibile.

Ci riferiremo, in questa prima analisi al solo **caso di funzionamento a pieno carico della MTG** rimandando per il funzionamento parzializzato al capitolo 7.3

Boundary conditions con alimentazione a metano

Nelle condizioni di pieno carico sono misurabili la portata in massa, la temperatura e la pressione dell'aria in uscita dal compressore. E' inoltre nota dalle prove sperimentali la portata in massa di combustibile a pieno carico e la pressione di iniezione in camera [28]:

- Portata di aria all'uscita dal compressore (misura sperimentale):

$$\dot{m}_{air_TOT} = 0,073 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

- Temperatura dell'aria in uscita dal compressore:

$$T_{air_TOT} = 812 [^{\circ}C]$$

- Pressione all'uscita dal compressore:

$$p_{air} = 3,834 [bar]$$

- Portata di combustibile:

$$\dot{m}_{fuel} = 0,000553 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

- Pressione di iniezione del combustibile nel *mixing tube*:

$$p_{fuel} = 5,8 [bar]$$

L'accesso dell'aria e del combustibile in camera primaria avviene per mezzo del *mixing tube*. La condizione al contorno principale da determinare è la portata di aria che deve entrare in camera primaria affinché sia realizzabile un rapporto di equivalenza pari a 2 in camera primaria. Si impone pertanto una portata in massa di aria sulla superficie di passaggio in ingresso all'ingresso del *mixing-tube* [28]:

Portata di aria inviata in camera primaria:

$$Metano \rightarrow \begin{cases} \phi_{prim} = 2 \\ \lambda_{st} = 17,39 \left[\frac{kg_{air}}{kg_{fuel}} \right] \end{cases} \rightarrow \phi = \frac{1/\lambda}{(1/\lambda)_{st}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)_{st}}$$

$$\dot{m}_{air_prim} = \frac{\dot{m}_{fuel}}{\phi_{prim} \cdot \left(\frac{1}{\lambda} \right)_{st}} = \frac{0,000553}{2 \cdot \left(\frac{1}{17,39} \right)} = 0,00481 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Risulta di conseguenza determinabile la restante quantità di aria che accederà al *liner* della camera per mezzo dei fori secondari e dei fori di diluizione:

Portata di aria inviata in camera secondaria:

$$\dot{m}_{air_TOT} = \dot{m}_{air_prim} + \dot{m}_{air_sec} \rightarrow \dot{m}_{air_sec} = \dot{m}_{air_TOT} - \dot{m}_{air_prim}$$

$$\dot{m}_{air_sec} = 0,073 - 0,00481 = 0,0682 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

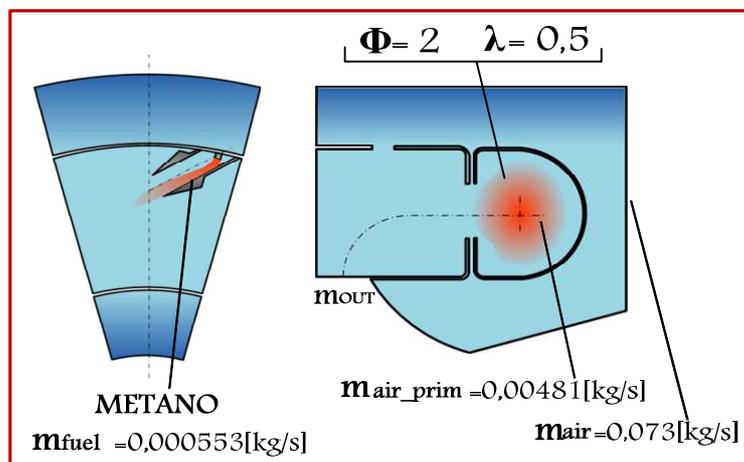


Fig 5.10

In tabella 5.4 è riportato un riassunto delle principali *boundary conditions* imposte nella combustione a pieno carico:

SIMULAZIONE METANO - ARIA			
CARATTERISTICHE	ARIA PRIMARIA	COMBUSTIBILE	U.M.
Portata	0,00481	0,000553	[kg/s]
Temperatura	812	290	[K]
Pressione	3,834	5,8	[bar]
Direzione del flusso	Normale alla sezione del <i>mixing tube</i>	Normale alla sezione di iniezione	[/]
Diametro idraulico	0,068	0,009	[m]
Frazione in massa della miscela	Y_{O2} = 0,233	Y_{CH4} = 0,233	[/]
	Y_{N2} = 0,767		[/]

Tab 5.4

Boundary conditions con alimentazione con singas da pirolisi di biomasse

Nelle condizioni di pieno le caratteristiche dell'aria proveniente dal compressore rimangono invariate rispetto al caso precedente. Si riportano invece la portata in massa di singas introdotta e la pressione di iniezione in camera:

- Portata di singas:

$$\dot{m}_{fuel} = 0,00307 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

- Pressione di iniezione del combustibile nel *mixing tube*:

$$p_{fuel} = 5,8 [bar]$$

Come spiegato nel caso del metano si passa alla determinazione della portata di aria che deve entrare in camera primaria affinché sia realizzabile un rapporto di equivalenza pari a 2. Si impone pertanto una portata in massa di aria sulla superficie di passaggio in ingresso all'ingresso del *mixing-tube*:

Portata di aria inviata in camera primaria:

$$Singas \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \phi_{prim} = 2 \\ \lambda_{st} = 2,787 \left[\frac{kg_{air}}{kg_{fuel}} \right] \end{array} \right. \rightarrow \phi = \frac{1/\lambda}{(1/\lambda)_{st}} = \frac{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)}{\left(\frac{\dot{m}_{fuel}}{\dot{m}_{air}} \right)_{st}}$$

$$\dot{m}_{air_prim} = \frac{\dot{m}_{fuel}}{\phi_{prim} \cdot \left(\frac{1}{\lambda}\right)_{st}} = \frac{0,00307}{2 \cdot \left(\frac{1}{2,787}\right)} = 0,00428 \left[\frac{kg}{s}\right]$$

Risulta di conseguenza determinabile la restante quantità di aria che accederà al *liner* della camera per mezzo dei fori secondari e dei fori di diluizione:

Portata di aria inviata in camera secondaria:

$$\dot{m}_{air_TOT} = \dot{m}_{air_prim} + \dot{m}_{air_sec} \quad \rightarrow \quad \dot{m}_{air_sec} = \dot{m}_{air_TOT} - \dot{m}_{air_prim}$$

$$\dot{m}_{air_sec} = 0,073 - 0,00428 = 0,0687 \left[\frac{kg}{s}\right]$$

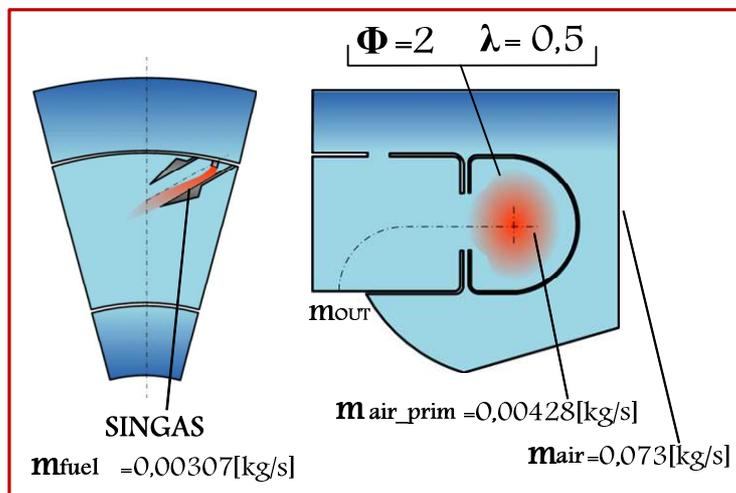


Fig 5.11

In tabella 5.5 è riportato un riassunto delle principali *boundary conditions* imposte nella combustione a pieno carico:

SIMULAZIONE SYNGAS - ARIA			
CARATTERISTICHE	ARIA PRIMARIA	COMBUSTIBILE	U.M.
Portata	0,00428	0,00307	[kg/s]
Temperatura	812	290	[K]
Pressione	3,834	5,8	[bar]
Direzione del flusso	Normale alla sezione del <i>mixing tube</i>	Normale alla sezione di iniezione	[/]
Diametro idraulico	0,068	0,009	[m]
Frazione in massa della miscela	$Y_{O_2} = 0,233$	$Y_{CH_4} = 0,113$	[/]
		$Y_{CO_2} = 0,562$	[/]
	$Y_{N_2} = 0,767$	$Y_{CO} = 0,273$	[/]
		$Y_{H_2} = 0,0047$	[/]

Tab 5.5

5.2.3 – Descrizione della seconda geometria (MTG2) e della griglia di calcolo

Rispetto alla geometria descritta, si è ritenuto opportuno realizzare una seconda geometria qui indicata con MTG2 che ha portato ad un miglioramento geometrico di alcune semplificazioni e alcuni problemi evidenziati dalla MTG1. La geometria “migliorata” è stata realizzata all’inizio del terzo anno di dottorato e se ne descrivono di seguito i vantaggi.

Anzitutto sono state distinte due geometrie definite con il termine MTG2: la prima riguarda il *liner* alimentato a gas naturale e la seconda invece la geometria alimentata con il singas per i quali erano state realizzate, nella precedente MTG1, delle *mesh* abbastanza grossolane di primo tentativo. Dovendo testare due combustibili (gas naturale e singas) è stata ripensata la grigliatura in entrambe. Le principali differenze geometriche che si possono notare nel confronto fra le due geometrie a diverso combustibile sono, in primo luogo, la forma dell’iniettore del combustibile (Vedi Fig 5.12). Per l’alimentazione a metano è stato modellato un iniettore a tre fori che meglio distribuisce il gas naturale in seno all’aria primaria. Tale aria primaria entra nella camera primaria attraverso appositi ugelli di iniezione (Vedi Fig 5.15). Nella geometria alimentata con singas l’iniettore è invece a foro unico. Questo perché, rispetto al caso del metano, si ha una maggior quantità di combustibile per unità di massa di aria che porta ad un accettabile miscelamento. Per questo non è sembrato necessario utilizzare una costosa configurazione dell’iniettore a tre fori che invece si è rivelata funzionale per il gas naturale.

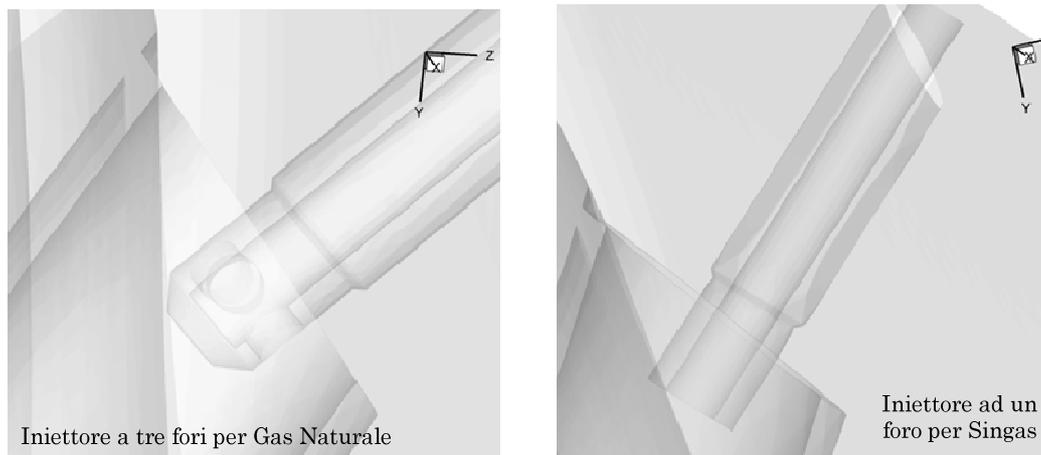


Fig 5.12

Nel confronto fra gli iniettori si necessita di diametro differente per la diversa quantità di combustibile necessaria a realizzare lo stesso rapporto di equivalenza Φ in camera primaria. In particolare il diametro interno di passaggio dell’aria nel *mixing tube* è pari a 12 mm mentre quello dell’iniettore del gas naturale è pari a 2 mm, più piccolo del corrispondente diametro per l’alimentazione con Singas la cui area di passaggio deve essere quadrupla a parità di potenza.

Per quanto riguarda invece le miglione delle geometrie MTG2 rispetto alle stesse originariamente a disposizione è possibile presentare le tre differenze più evidenti. Di considerevole importanza è stata la smussatura costruita nella regione del dominio prossima all’ingresso in turbina, all’esterno del *liner*. In questa regione l’aria secondaria che percorre esternamente il *liner* entra attraverso i fori di diluizione per raffreddare i fumi entranti in turbina allo scopo di abbassarne la temperatura a valori termicamente accettabili dallo stadio di espansione. La smussatura della parete terminale di

confine del dominio garantisce una riduzione delle perdite di carico e una migliore guida all'aria secondaria nell'accesso ai fori. La differenza è visualizzabile nella seguente Figura 5.13:

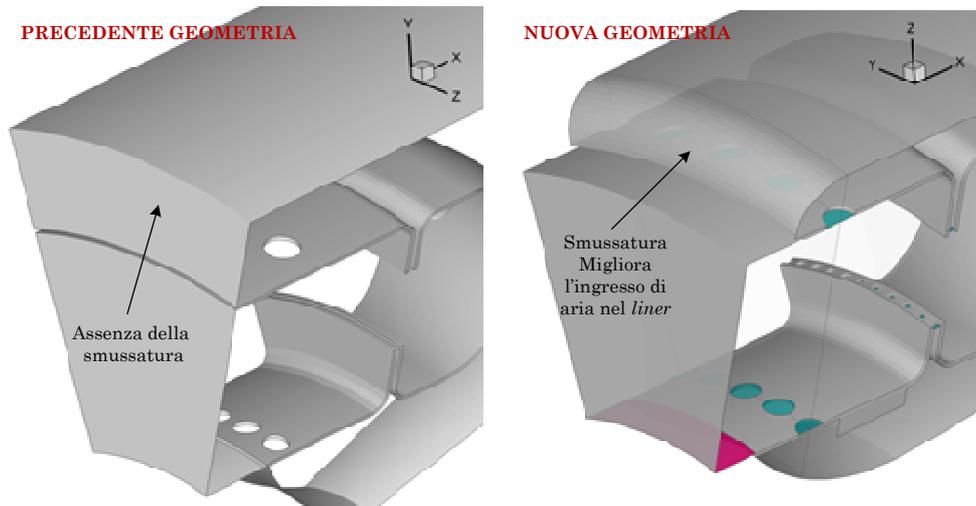


Fig 5.13

Nella gola di separazione fra le due camere del *liner* è previsto l'ingresso dell'aria di diluizione che impone il passaggio da una combustione ricca alla combustione povera. Sono stati per questo realizzati tutti i fori a forma rettangolare effettivamente presenti sul prototipo di MTG che sostituiscono la precedente schematizzazione di un'area di ingresso equivalente che si aveva nella precedente geometria. La differenza è visualizzabile nella seguente Figura 5.14:

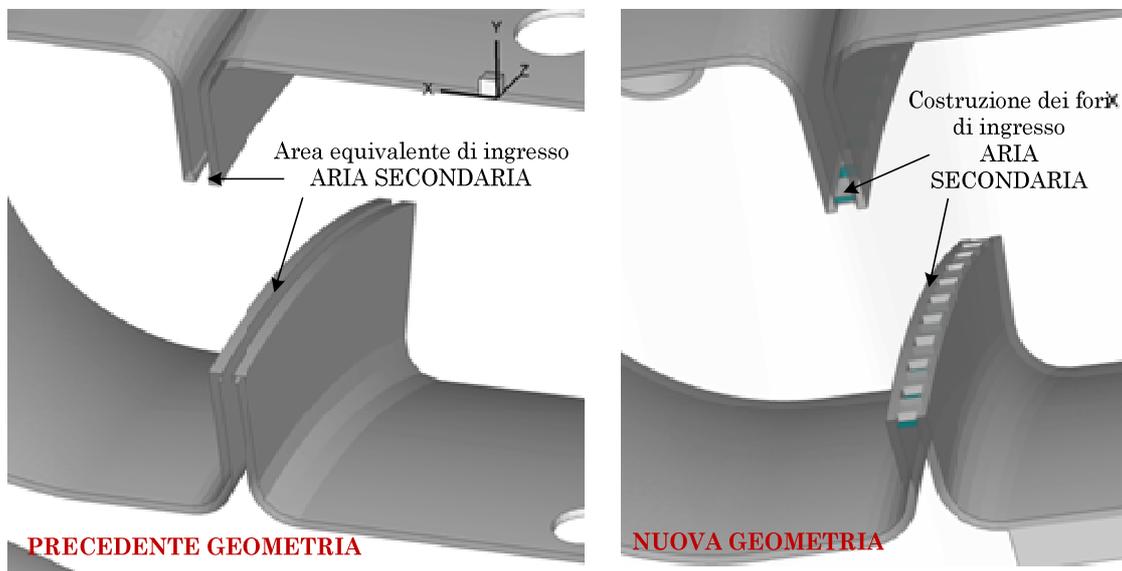


Fig 5.14

In ultimo è opportuno indicare la maggior precisione costruttiva degli iniettori del combustibile e degli ugelli nelle geometrie nuove rispetto a quelle preesistenti. In particolare è stato considerato l'ingombro effettivo dell'iniettore anche all'esterno dell'ugello e la corrispondente riduzione della sezione di passaggio dell'aria primaria all'ingresso dello stesso che prima era trascurata. Se ne riporta una immagine relativa all'alimentazione a metano:

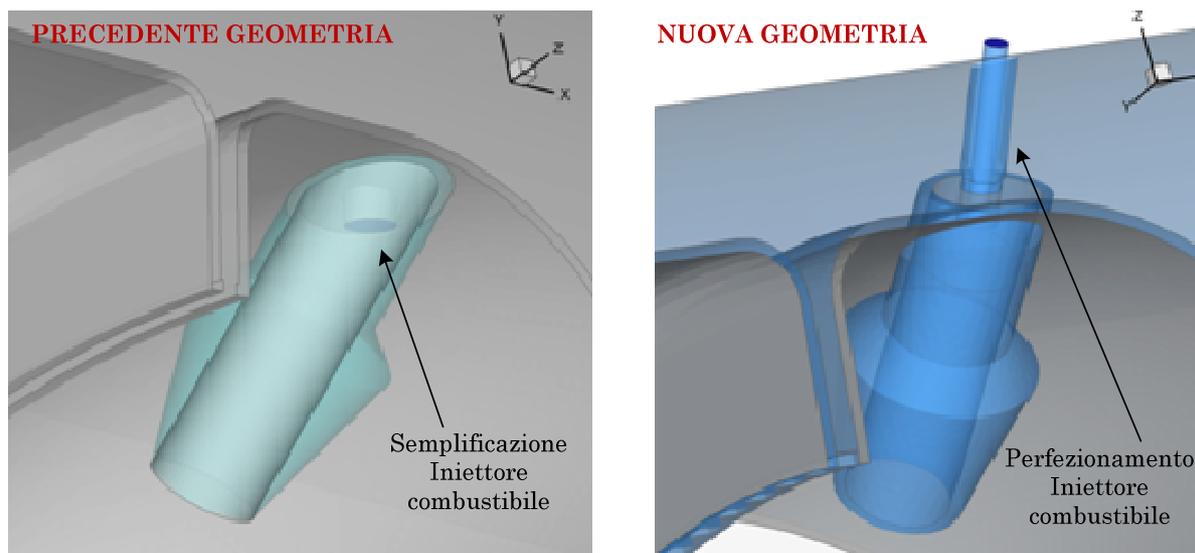


Fig 5.15

Definite queste essenziali caratteristiche è stato preso in esame anche l'aspetto più materialmente "costruttivo" della nuova *mesh*, ragionamento ripetuto parallelamente per entrambe le geometrie in costruzione; infatti sul dominio tridimensionale di calcolo sono stati individuati alcuni piani ritenuti di particolare importanza, sui quali fosse possibile, a valle delle simulazioni, raccogliere dati medi e distribuzioni delle grandezze fisiche di interesse. A questo proposito, all'interno degli ugelli di iniezione sono stati individuati una serie di piani equidistanti partendo dalla sezione di ingresso dell'aria primaria fino alla sezione di uscita dell'ugello in camera primaria. Le sezioni costruite sono indicate nella seguente Figura 5.16:

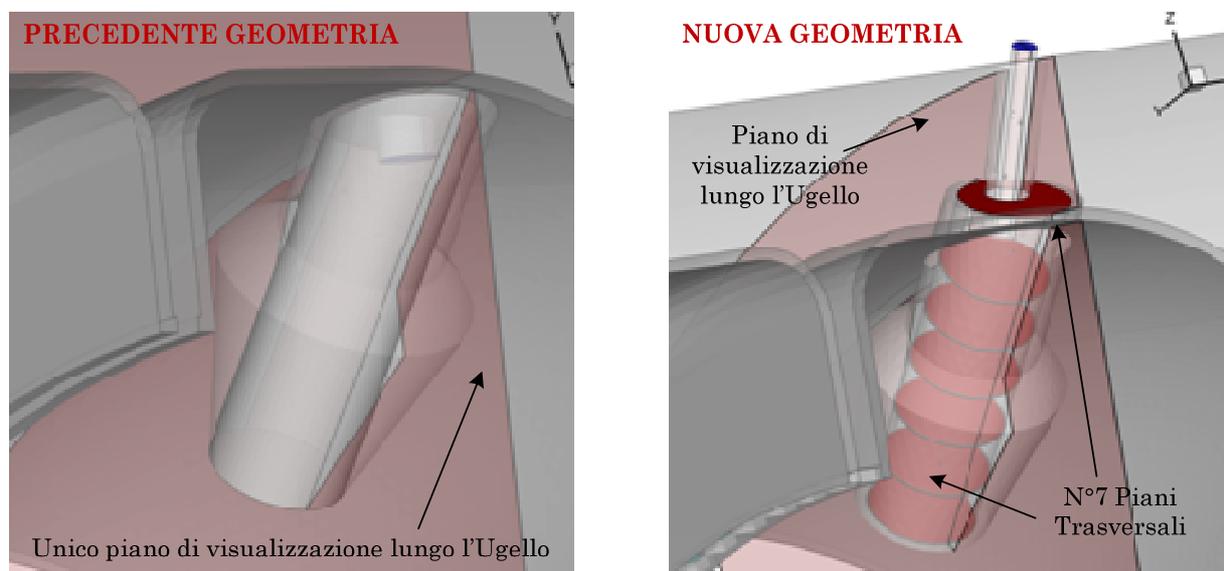


Fig 5.16

Sempre per lo stesso scopo sono state realizzate quattro sezioni di misura nella gola di collegamento fra camera primaria e camera secondaria del *liner*. In queste sezioni è noto che i reagenti in combustione devono passare da un ambiente ricco ad un ambiente povero ad alta velocità e la

predisposizione di piani di misura è risultata utile per tenere sotto controllo il verificarsi di queste condizioni.

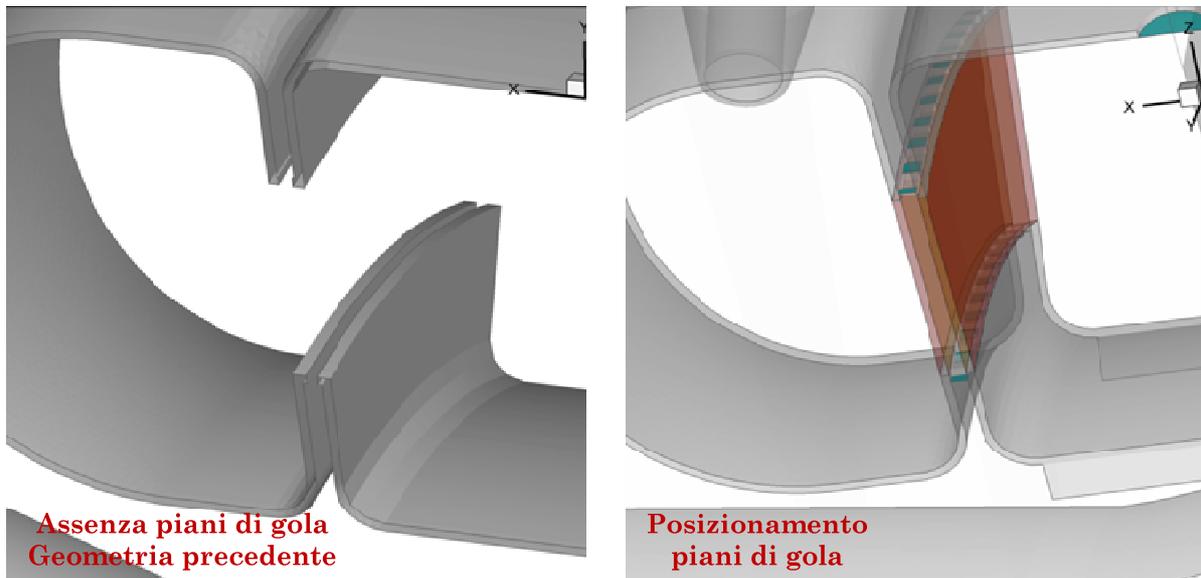


Fig 5.17

In ultimo sono state individuati due piani di controllo e misura in prossimità dei fori di diluizione e in altre due posizioni intermedie della camera secondaria. Altri piani di misura sono stati realizzati in corrispondenza dei fori di diluizione radiali esterni ed interni al *liner*. Tutte queste predisposizioni non erano previste nella *mesh* precedente sulla quale era difficile ottenere una stima del comportamento dei fluidi in combustione nelle diverse parti della geometria. Con le modifiche descritte si è ottenuto uno strumento di indagine numerica molto più efficace.

L'ultimo passo è stato quello di realizzazione della *mesh* vera e propria. La discretizzazione del volume di calcolo è stata ottenuta dividendolo dapprima in tanti sotto-volumi disposti nelle diverse parti della geometria. Volumi più piccoli nei punti più complessi ed importanti dal punto di vista fluidodinamico del sistema o laddove si concentrano le reazioni di combustione e volumi più grandi nelle restanti parti di contorno. La differenziazione del settore totale di camera in tanti volumi di più piccola entità intelligentemente distribuiti ha permesso di costruirvi all'interno grigliature a maggiore o minore infittimento a seconda dell'importanza della posizione per aumentare dove necessario la precisione del calcolo numerico. Con questo criterio è stata eseguita tutta la grigliatura infittendo gli elementi nell'ugello, nei volumi di accesso e di uscita ai vari fori, nella zona di miscelamento di combustibile con aria primaria e nell'ingresso dell'aria secondaria nella gola di separazione fra le due camere. All'interno della camera toroidale primaria e in tutta la zona dell'ugello, la complicata forma della geometria rende impossibile l'utilizzo di celle esaedriche strutturate e si è optato per una soluzione in elementi tetraedrici sicuramente meglio gestibile. Tutte le restanti parti della geometria sono state invece riempite con elementi strutturati esaedrici. Si riporta, come visione d'insieme del lavoro ultimato, la geometria MTG2 discretizzata, pronta per l'importazione nel codice di calcolo:

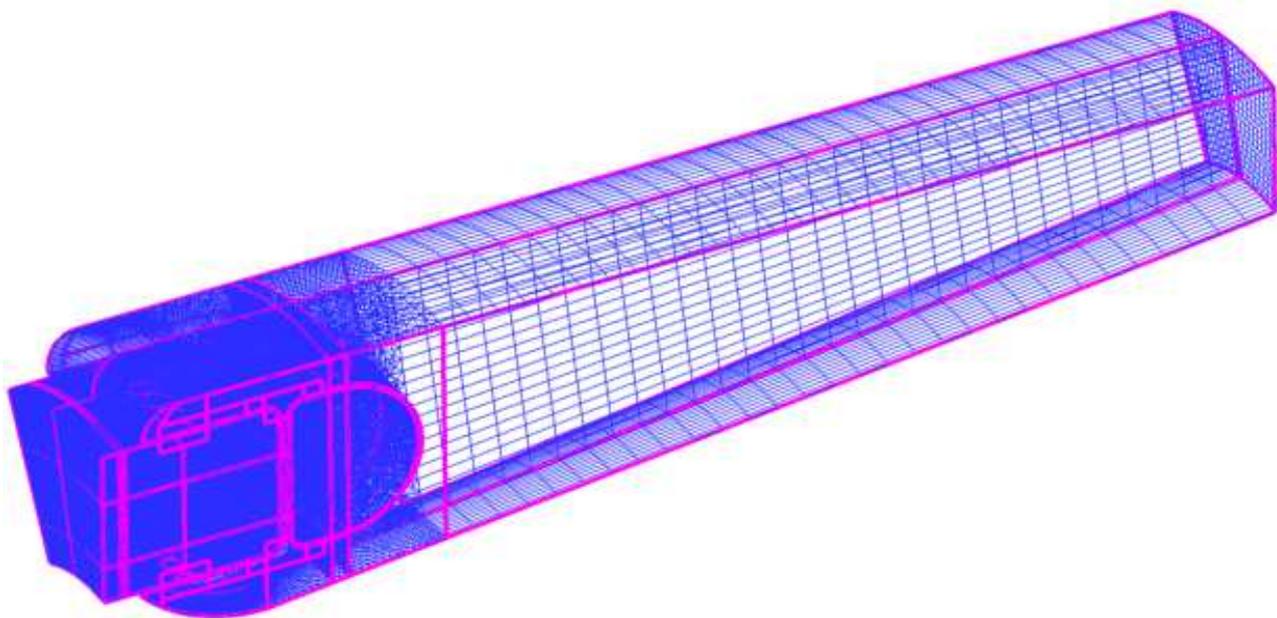


Fig 5.18

5.2.4 – Modifica delle condizioni al contorno

Per quanto riguarda l'imposizione delle condizioni al contorno passando dalle geometrie del tipo MTG1 alle successive MTG2 è necessario anzitutto sottolineare la differenza più evidente, ovvero il fatto che nelle geometrie MTG2 si è deciso di non imporre le portate in massa di aria primaria in ingresso all'interno del *mixing tube*. Mentre la geometria MTG1 prevedeva l'imposizione di questa massa per assicurare il rapporto di equivalenza nominale in camera primaria, con MTG2 si è lasciata "libertà" al software CFD di determinare fluidodinamicamente la portata di aria in ingresso all'ugello, in base alla disposizione del campo di moto predetta al passare delle iterazioni. I risultati saranno presentati nei successivi capitoli e risultano sicuramente più aderenti alla realtà in quanto è chiaro che anche nelle sperimentazioni il rapporto di equivalenza non è strettamente costante ma variabile in funzione delle variazioni di portata imposte dalla caratteristica caoticità dei flussi turbolenti. In generale si è verificato un aumento di ϕ in camera primaria, dovuto alla minore aria effettivamente entrante. Ovviamente tutta l'aria non più inserita in camera primaria viene poi ad aggiungersi nelle successive fasi di diluizione accentuando il principio teorico di funzionamento delle camere ricche-povere in esame.

6 SIMULAZIONI ESEGUITE SULLA CAMERA SPERIMENTALE DI LABORATORIO

6.1 Simulazioni RANS – Variazioni del combustibile e dei modelli di combustione

6.1.1 – Impostazioni e simulazioni RANS del campo si moto a freddo

L'impostazione delle condizioni al contorno è stata realizzata imponendo nel codice commerciale di calcolo utilizzato FLUENT 6.3 i parametri calcolati e presentati nel precedente capitolo 5.1.3.

In particolare per simulazione “a freddo” si intende il calcolo numerico della distribuzione di pressione e velocità in assenza di combustione. Si realizza quindi il calcolo discreto delle equazioni di Navier-Stokes su tutte le celle del dominio computazionale considerato per il combustore sperimentale da laboratorio oggetto dell'analisi.

L'importanza di questo calcolo, precedente a quello di combustione, è stato essenziale per determinare il modello RANS di turbolenza più idoneo alla rappresentazione numerica della fisica del sistema. Il codice FLUENT mette a disposizione diversi modelli e con questa serie di simulazioni è stata valutata la predizione del campo di velocità di ognuno di essi.

Le migliori simulazioni sono state ottenute con l'applicazione del modello di turbolenza $k-\epsilon$ [32] nelle due versioni “Standard” e “Realizable” e con l'utilizzo del modello RSM (*Reynolds stress model*) di cui sono riportati i risultati nel seguente paragrafo 6.1.4.1

Le motivazioni che hanno spinto ad una attenta analisi del campo di moto a freddo sono dovute anzitutto alla disponibilità di risultati sperimentali in assenza di combustione [29]. In particolare, nella figura seguente sono riportati i dati sperimentali di distribuzione delle velocità assiali, radiali e tangenziali misurati alla traversa della camera corrispondente a 3 mm:

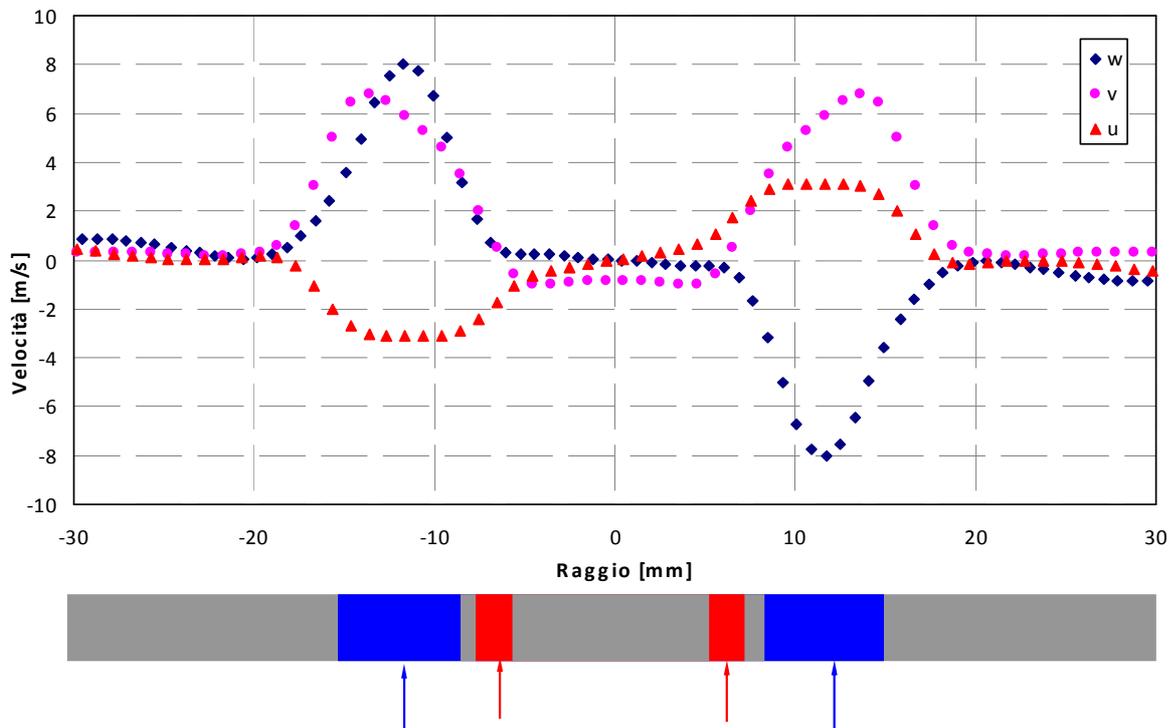


Fig 6.1

Oltre a questi sono a disposizione le distribuzioni di velocità ottenute dall'elaborazione di immagini sperimentali PIV realizzate sul prototipo di camera installato presso l'università di Trieste [29] che si riportano nella successiva figura 6.2:

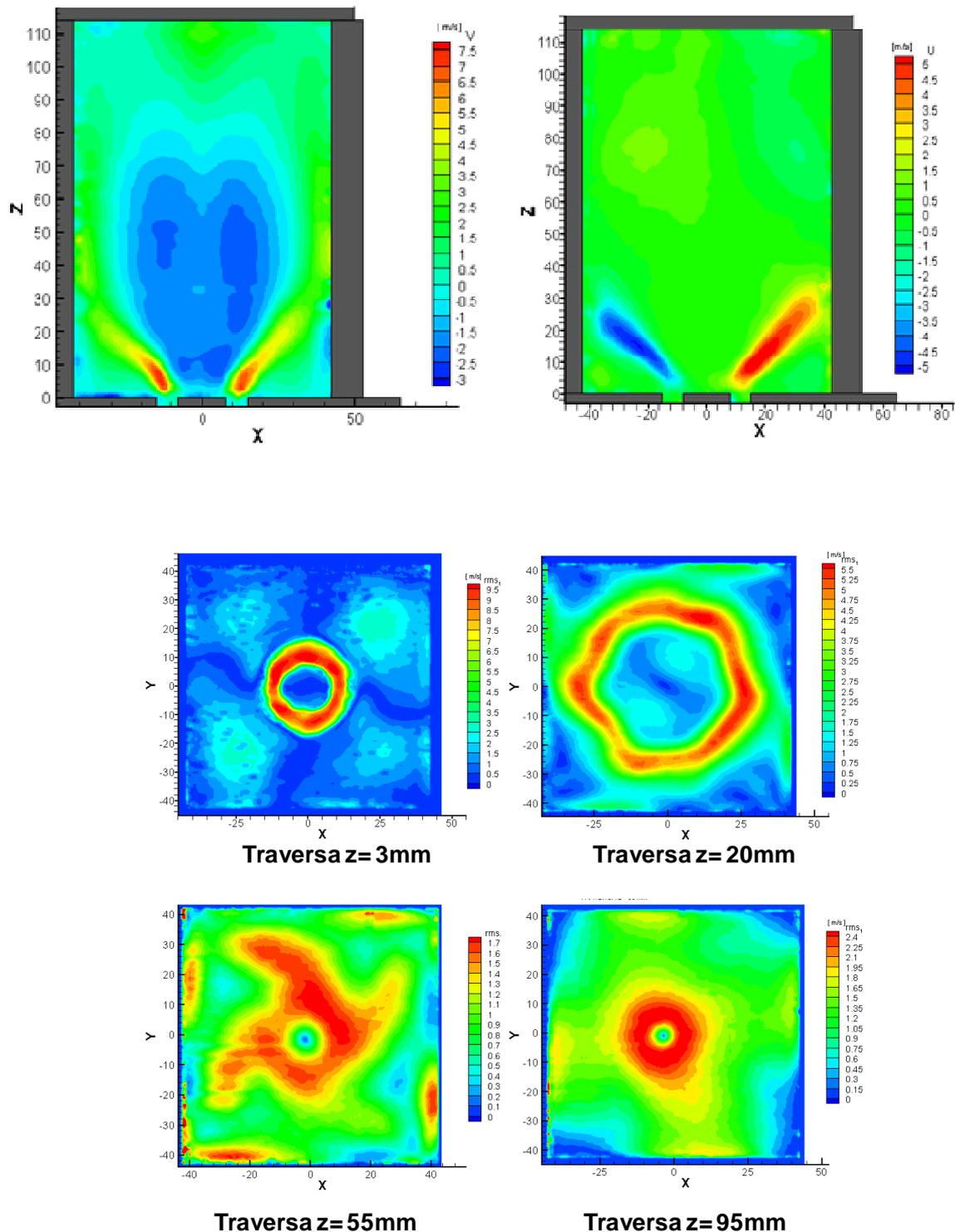


Fig 6.2

Con le simulazioni a freddo è stato ricercato il modello di combustione che meglio fosse capace di riprodurre la corretta distribuzione di velocità sperimentale in modo da essere certi di avere una buona base di partenza per le successive simulazioni di combustione.

Le impostazioni settate sul codice di calcolo sono state quindi la lettura della geometria discretizzata e l'imposizione su di essa delle *boundary condition* presentate al paragrafo 5.1.3 dapprima per la simulazione relativa ad un ingresso di aria pari a 150 [Slpm] e poi alla simulazione con ingresso di 250 [Slpm] di aria, al variare dei diversi combustibili.

Quindi si sono succeduti i seguenti settaggi:

- Impostazione del solutore di calcolo stazionario
- Impostazione delle frazioni in massa costituenti l'aria ed i diversi combustibili
- Impostazione dei diversi modelli di turbolenza RANS
- Definizione delle boundary conditions proposte al paragrafo 5.1.3

In particolare:

- Impostazione delle portate in massa di aria e combustibile
 - Impostazione dei vettori di velocità di ingresso imposti dallo swirl
 - Temperature di ingresso dei reagenti
 - Definizione della temperatura delle pareti della camera
-
- Impostazione delle equazioni da risolvere su ogni cella (continuità, Navier-Stokes)
 - Impostazione degli algoritmi di soluzione e della precisione di discretizzazione
 - Imposizione del numero di iterazioni
 - Analisi dei risultati

I migliori risultati ottenuti numericamente con questa serie di simulazioni sono riportati nel successivo paragrafo 6.1.4.1 dedicato

6.1.2 – Simulazioni della combustione con modelli Flamelet

6.1.2.1 – Fase di pre-processing

Il cosiddetto calcolo di pre-processing delle Flamelets è la prima fase che deve essere implementata nell'applicazione del modello Flamelet. In questa fase vengono definite tutte le proprietà chimiche della combustione delle Flamelets che andranno a costituire la fiamma tridimensionale turbolenta del bruciatore sperimentale.

Una *Flamelet* viene modellata come una singola fiammella in controcorrente in cui le condizioni di combustione vengono generate mediante un ugello di ingresso del combustibile e un secondo ingresso di ossidante posizionati frontalmente, l'uno opposto all'altro.

Le informazioni fornite per la fase di pre-processing relativamente alle simulazioni Flamelets sul bruciatore sperimentale, sono state nell'ordine le seguenti:

- All'ingresso del combustibile sono state impostate le frazioni in massa di tutti i costituenti del *fuel*, diverse a seconda che si voglia utilizzare singas, propano o metano; per l'ingresso dell'ossidante, invece, sono state inserite le frazioni in massa dei costituenti l'aria comburente. Le condizioni iniziali dei reagenti nella Flamelet sono infine completate fornendo informazioni su temperature e pressioni agli ingressi.

- All'interno del codice di calcolo vengono importate tutte le reazioni che sono coinvolte nella combustione dei reagenti. Vengono quindi importati i file contenenti il meccanismo cinetico come elenco delle reazioni di cui il codice deve tener conto e il file contenente le proprietà fisiche di tutti i costituenti di combustibile e ossidante. In tale file devono infine essere comprese le proprietà fisiche delle specie intermedie e finali che possono generarsi nel processo di combustione. Come esempio si propone uno dei file, scritto con il programma CHEMKIN che mostra la sintassi tipica di lettura utilizzata dal codice per implementare le reazioni nel successivo calcolo di combustione [12]:

```

ELEMENTS
H O C N
END
SPECIES
CH3O H O CH3
HCO CH2O HO2 H2O2
OH CO CO2 O2
H2O CH4 H2 N2
END
REACTIONS    CAL/MOLE
H+O2=OH+O    2.000E14    0.0    16800.0
O+H2=OH+H    1.800E10    1.0    8826.0
H2+OH=H2O+H  1.170E09    1.3    3626.0
OH+OH=O+H2O  6.000E08    1.3    0.0
H+O2+M=HO2+M 2.300E18    -0.8    0.0
  CH4/6.5/ H2O/6.5/ CO2/1.5/ H2/1.0/ CO/0.75/ N2/0.4/ O2/0.4/
H+HO2=OH+OH  1.500E14    0.0    1004.0
H+HO2=H2+O2  2.500E13    0.0    700.0
OH+HO2=H2O+O2 2.000E13    0.0    1000.0
CO+OH=CO2+H  1.510E7    1.3    -758.0
CH4=CH3+H    2.3E38    -7.0    114360.0
CH4+H=CH3+H2 2.200E04    3.0    8750.0
CH4+OH=CH3+H2O 1.600E06    2.1    2460.0
CH3+O=CH2O+H  6.800E13    0.0    0.0
CH2O+H=HCO+H2 2.500E13    0.0    3991.0
CH2O+OH=HCO+H2O 3.000E13    0.0    1195.0
HCO+H=CO+H2  4.000E13    0.0    0.0
HCO+M=CO+H+M 1.600E14    0.0    14700.0
CH3+O2=CH3O+O 7.000E12    0.0    25652.0
CH3O+H=CH2O+H2 2.000E13    0.0    0.0
CH3O+M=CH2O+H+M 2.400E13    0.0    28812.0
HO2+HO2=H2O2+O2 2.000E12    0.0    0.0
H2O2+M=OH+OH+M 1.300E17    0.0    45500.0
H2O2+OH=H2O+HO2 1.000E13    0.0    1800.0
OH+H+M=H2O+M 2.200E22    -2.0    0.0
  CH4/6.5/ H2O/6.5/ CO2/1.5/ H2/1.0/ CO/0.75/ N2/0.4/ O2/0.4/
H+H+M=H2+M    1.800E18    -1.0    0.0
  CH4/6.5/ H2O/6.5/ CO2/1.5/ H2/1.0/ CO/0.75/ N2/0.4/ O2/0.4/
END
! Skeletal rate data extracted from SANDIA-report.
! Warnatz adaption of reations 10 and 11 implemented
! Reverse rates implemented.
! Page 23 Smookes

```

Combustione del metano – Meccanismo cinetico di Smooke

Fig 6.3

Un esempio del file contenente le proprietà fisiche di tutte le specie considerate in un processo di combustione è del tipo seguente [12]:

```

THERMO
300.000 1000.000 5000.000
(CH2O)3 70590C 3H 6O 3 G 0300.00 4000.00 1500.00 1
0.01913678E+03 0.08578044E-01-0.08882060E-05-0.03574819E-08 0.06605142E-12 2
-0.06560876E+06-0.08432507E+03-0.04662286E+02 0.06091547E+00-0.04710536E-03 3
0.01968843E-06-0.03563271E-10-0.05665403E+06 0.04525264E+03 4
(CH3)2SICH2 61991H 8C 3SI 1 G 0300.00 2500.00 1500.00 1
0.15478518E+02 0.10657002E-01-0.12343446E-06-0.12933515E-08 0.02528714E-11 2
-0.06693076E+04-0.05358884E+03 0.02027522E+02 0.04408673E+00-0.03370023E-03 3
0.14844662E-07-0.02830898E-10 0.03931453E+05 0.01815820E+03 4
AL 62987AL 1 G 0300.00 5000.00 0600.00 1
0.02559589E+02-0.10632239E-03 0.07202828E-06-0.02121105E-09 0.02289429E-13 2
0.03890214E+06 0.05234522E+02 0.02736825E+02-0.05912374E-02-0.04033937E-05 3
0.02322343E-07-0.01705599E-10 0.03886794E+06 0.04363879E+02 4
AL2H6 62987AL 2H 6 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.02634884E+02 0.02135952E+00 0.03154151E-05-0.07684674E-07 0.02335831E-10 2
0.08871346E+05 0.09827515E+02-0.06800681E+02 0.05080744E+00 0.10397471E-04 3
-0.11195819E-06 0.08459155E-09 0.10605371E+05 0.05554526E+03 4
AL2ME6 62987AL 2C 6H 18 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.01773147E+03 0.04935747E+00 0.11968535E-05-0.16398263E-07 0.04890867E-10 2
-0.03855560E+06-0.05053298E+03-0.07159750E+01 0.10671087E+00 0.02117604E-03 3
-0.02193211E-05 0.16441438E-09-0.03515546E+06 0.03890762E+03 4
ALAS 62987AL 1AS 1 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.04790026E+02-0.01908225E-03-0.01983390E-05 0.02239358E-08-0.06904706E-12 2
0.05259290E+06 0.03259703E+02 0.05047764E+02-0.06419947E-02-0.14320714E-05 3
0.04754390E-07-0.03297621E-10 0.05254264E+06 0.01985205E+02 4
ALH 62987AL 1H 1 G 0300.00 5000.00 1000.00 1
0.03392644E+02 0.12153990E-02-0.04676595E-05 0.08691624E-09-0.06022668E-13 2
0.03006845E+06 0.02758899E+02 0.03071503E+02 0.02165549E-01-0.03275638E-04 3
0.04136983E-07-0.01877120E-10 0.03021221E+06 0.04548855E+02 4
ALH2 62987AL 1H 2 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.04486543E+02 0.03128831E-01-0.01969438E-05-0.10160304E-08 0.03497468E-11 2
0.01960959E+06 0.08167897E+01 0.02442136E+02 0.09915913E-01 0.02471082E-05 3
-0.02119583E-06 0.01710233E-09 0.01997587E+06 0.10652699E+02 4
ALH3 62987AL 1H 3 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.04186837E+02 0.06159249E-01-0.03877593E-06-0.02061928E-07 0.06600276E-11 2
0.07908078E+05 0.05134396E+01 0.10083231E+01 0.16403245E-01 0.01976746E-04 3
-0.03528558E-06 0.02753377E-09 0.08484656E+05 0.15858377E+02 4
ALME 62987AL 1C 1H 3 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.04662737E+02 0.07097939E-01 0.02520013E-05-0.02114863E-07 0.06097489E-11 2
0.08203227E+05 0.01769244E+02 0.02664176E+02 0.13249141E-01 0.02525847E-04 3
-0.02394396E-06 0.01761854E-09 0.08574173E+05 0.11474494E+02 4
ALME2 62987AL 1C 2H 6 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.06481282E+02 0.14746049E-01 0.05816529E-05-0.04621347E-07 0.13960405E-11 2
0.03745072E+05-0.02603325E+02 0.09494573E+01 0.03206353E+00 0.06134020E-04 3
-0.06500042E-06 0.04911485E-09 0.04761408E+05 0.02419465E+03 4
ALME3 62987AL 1C 3H 9 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.06654948E+02 0.02455144E+00 0.11765745E-05-0.07815023E-07 0.02255622E-10 2
-0.13409524E+05-0.03454481E+02-0.07027567E+01 0.04682764E+00 0.11499028E-04 3
-0.09160441E-06 0.06687293E-09-0.12037989E+05 0.03232771E+03 4
AR 120186AR 1 G 0300.00 5000.00 1000.00 1
0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 2
-0.07453750E+04 0.04366000E+02 0.02500000E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 3
0.00000000E+00 0.00000000E+00-0.07453750E+04 0.04366000E+02 4
AR+ 121286AR 1E -1 G 0300.00 5000.00 1000.00 1
0.02864864E+02-0.12035732E-03-0.10651992E-07 0.09074839E-10-0.09623876E-14 2
0.01827230E+07 0.03543584E+02 0.02301341E+02 0.08035528E-02-0.01758805E-05 3
-0.01781093E-08-0.08937268E-13 0.01829281E+07 0.06659358E+02 4
AS 62987AS 1 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.02617010E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.00000000E+00 2
0.03720454E+06 0.06995524E+02 0.02617010E+02 0.00000000E+00 0.00000000E+00 3
0.00000000E+00 0.00000000E+00 0.03720454E+06 0.06995524E+02 4
AS2 62987AS 2 G 0300.00 1500.00 0600.00 1
0.04394201E+02 0.05389968E-02-0.02379401E-05-0.06541924E-09 0.05184186E-12 2
0.02235093E+06 0.04897918E+02 0.03682891E+02 0.03121811E-01-0.10740519E-05 3
-0.05629472E-07 0.05178811E-10 0.02247355E+06 0.08283423E+02

```

Prime righe di codice del “Thermodynamics file” allegato al meccanismo cinetico di Smooke

Fig 6.4

- Il codice conosce ora tutte le reazioni e le condizioni iniziali di ingresso per l’esecuzione del calcolo di combustione. Occorre fornire informazioni sul tipo di integrazione numerica che deve essere eseguita proposte dal codice

Le citate condizioni vengono dette “*initial conditions*”, informazioni essenziali per l’integrazione delle equazioni delle *Flamelets*. E’ stato lanciato quindi il calcolo di *pre-processing* della *Flamelet* che ha permesso di definire le caratteristiche chimiche di combustione, temperatura e frazione in massa di tutte le specie coinvolte in tutta la griglia di punti impostata per la singola *Flamelet* generata. Questo calcolo implementa due tipologie di equazioni definite come “equazioni della *Flamelet*” (vedi par. 4.2.2.4)

I risultati dell'integrazione devono essere infine salvati nel sistema. Lo stoccaggio delle informazioni chimiche di combustione realizzate nel *pre-processing* viene operativamente realizzato costruendo un "Flamelet file". Questo file è caratterizzato dall'estensione ".fla" e contiene le caratteristiche di temperatura e di frazione in massa delle specie coinvolte in combustione per tutti i valori di *scalar dissipation* calcolati nell'integrazione delle *Flamelets*. Un esempio di *Flamelet file* è quello riportato a seguito [12]:

```

HEADER
CHI 0.000000E+000
NUMOFSPECIES 16
GRIDPOINTS 50
PRESSURE 1.013250E+005
BODY
Z
0.000000000E+000 9.544798360E-003 1.749879699E-002 2.412712919E-002 2.965073935E-002
3.425374782E-002 3.808958821E-002 4.128612187E-002 4.394989991E-002 4.616971496E-002
4.801956082E-002 4.956109905E-002 5.084571423E-002 5.191622689E-002 5.280832076E-002
5.355173233E-002 5.417124197E-002 5.468750000E-002 5.524222522E-002 5.590789549E-002
5.670669981E-002 5.766526500E-002 5.881554322E-002 6.019587709E-002 6.185227773E-002
6.383995850E-002 6.622517542E-002 6.908743573E-002 7.252214809E-002 7.664380294E-002
8.158978875E-002 8.752497172E-002 9.464719128E-002 1.031938548E-001 1.134498509E-001
1.257570464E-001 1.405256808E-001 1.582480422E-001 1.795148759E-001 2.050350763E-001
2.356593168E-001 2.724084054E-001 3.165073117E-001 3.694259992E-001 4.329284243E-001
5.091313344E-001 6.005748265E-001 7.103070170E-001 8.419856456E-001 1.000000000E+000
TEMPERATURE
3.100000000E+002 7.565299534E+002 1.085529460E+003 1.337199584E+003 1.534224784E+003
1.690167122E+003 1.814173363E+003 1.912804138E+003 1.991000217E+003 2.052642420E+003
2.100874984E+003 2.138284978E+003 2.167010275E+003 2.188814796E+003 2.205152269E+003
2.217219601E+003 2.225998519E+003 2.232287040E+003 2.237859875E+003 2.242721954E+003
2.245631698E+003 2.244686428E+003 2.237682113E+003 2.223115347E+003 2.200731310E+003
2.170831575E+003 2.133473123E+003 2.088256905E+003 2.034400733E+003 1.970825007E+003
1.896203692E+003 1.809003728E+003 1.707481024E+003 1.589751024E+003 1.453921338E+003
1.298235447E+003 1.132565849E+003 1.046869674E+003 1.009601924E+003 9.827261409E+002
9.586900424E+002 9.347468982E+002 9.091887677E+002 8.803482575E+002 8.459270365E+002
8.018621920E+002 7.395081968E+002 6.413814042E+002 4.933629656E+002 3.100000000E+002
massfraction-ch3o
0.000000000E+000 0.000000000E+000 1.397076583E-029 4.049266077E-029 7.103733344E-029
1.342780306E-026 9.786069532E-025 2.195651175E-023 2.265897416E-022 1.364265926E-021
5.572778712E-021 1.708121483E-020 4.212359544E-020 8.781423446E-020 1.603829347E-019
2.634769972E-019 3.971385315E-019 5.577484889E-019 8.011943748E-019 1.231037044E-018
2.037154784E-018 3.624746186E-018 6.801857468E-018 1.296623841E-017 2.417766813E-017
4.311112404E-017 7.278994494E-017 1.157490718E-016 1.722937527E-016 2.378835830E-016
3.007737861E-016 3.378531077E-016 3.196842827E-016 2.708207518E-016 3.735837925E-016
1.103081204E-015 2.393629709E-015 2.645567602E-015 2.435554193E-015 2.123125011E-015
1.762799845E-015 1.378803285E-015 9.938363486E-016 6.350290279E-016 3.344496127E-016
1.242880314E-016 2.185813099E-017 5.703131770E-019 0.000000000E+000 0.000000000E+000
massfraction-h
0.000000000E+000 3.614193160E-025 5.861372983E-015 1.038845007E-011 9.266351685E-010
1.333376746E-008 8.187792882E-008 2.994619534E-007 7.786006042E-007 1.598215811E-006
2.768666936E-006 4.232835148E-006 5.891583106E-006 7.633924727E-006 9.359815623E-006
1.099241996E-005 1.248158707E-005 1.380166134E-005 1.528350339E-005 1.711254976E-005
1.929710962E-005 2.172841681E-005 2.409762028E-005 2.593485157E-005 2.681096765E-005
2.647495506E-005 2.484325196E-005 2.197795577E-005 1.810697821E-005 1.364511994E-005
9.146877049E-006 5.142177151E-006 2.227608499E-006 8.106245696E-007 4.577664392E-007
5.117381376E-007 5.588782265E-007 5.722295548E-007 5.654473604E-007 5.515654800E-007
5.324176035E-007 5.079468334E-007 4.774331455E-007 4.396675636E-007 3.928625810E-007
3.343756339E-007 2.601914849E-007 1.653190439E-007 9.647483646E-008 0.000000000E+000

```

Prime righe di codice di un *Flamelet file* del singas che riporta temperature e frazioni in massa delle specie per diversi valori della frazione di miscela

Fig 6.5

Dalle simulazioni a freddo sono state avviate le simulazioni a caldo generando i campi della frazione di miscela e della sua varianza e con la successiva interrogazione delle *look-up table*, così come descritto nel paragrafo 4.2.2.4, si sono ottenuti i risultati delle simulazioni a caldo che saranno presentati nella sezione successiva. Le simulazioni sono state impostate settando nel codice FLUENT le condizioni al contorno descritte nel paragrafo 5.1.3.

6.1.2.2 – Applicazione del modello Unsteady Flamelet

Il modello *unsteady flamelet* è stato sempre applicato partendo dalla simulazione in combustione con il modello *steady laminar flamelet* precedentemente spiegata. Come visto nel paragrafo 4.2.4 relativo alla teoria del modello *unsteady*, si ha infatti che la sua applicazione è principalmente volta all'analisi delle emissioni inquinanti delle specie aventi chimica più lenta, per le quali la predizione proposta dal modello *flamelet* può essere errata anche di un ordine di grandezza. Per mezzo di una simulazione non-stazionaria il modello segue l'evoluzione chimica di un certo numero di particelle, imposte tramite il codice di calcolo e la simulazione è mirata a catturare la lenta chimica di formazione degli NOx.

Per effettuare la simulazione un *steady* occorre utilizzare come condizione iniziale di partenza la simulazione *steady flamelet* risolta fino al raggiungimento della convergenza in quanto il modello *unsteady* necessita di una fiamma completamente sviluppata e corretta per seguire all'interno, tramite una equazione di controllo della probabilità, lo spostamento simulato delle particelle inserite all'interno (marcatori).

Essendo i marcatori rappresentati da *flamelet* occorre anzitutto fornire al software [12]:

- Numero di punti griglia nella flamelet – Ovvero il numero di punti a diverso valore di Z (compresa fra 0 e 1) per i quali eseguire il calcolo di tutti gli scalari di combustione nella fase di *pre-processing*. Maggiore il numero di punti, più accurato risulta il calcolo

Sia nel caso del metano che nel caso del singas sono state realizzate diverse prove test scegliendo infine un numero di punto griglia pari a 40

- Limite inferiore della frazione di miscela per la probabilità iniziale di trovare una flamelet – Nel caso delle simulazioni effettuate sul combustore in esame è stato settato un limite inferiore di probabilità pari ad 1 (certezza) per tutti i valori medi della frazione di miscela aventi un valore superiore al “*Mixture fraction lower limit for initial probability*” e zero (assenza *flamelet*) per tutti i valori medi inferiori.

Tale limite può essere specificato essere maggiore della frazione di miscela stechiometrica. Nelle simulazioni alimentate con singas è stato scelto un valore pari a 0,4 mentre per il metano è sufficiente 0,1

- Scalar dissipation massima – Le *flamelets* laminari possono incorrere in estinzione ad alti valori della *scalar dissipation* in quanto la diffusione nelle *flamelet* disturba fino a impedire le reazioni. Per evitare una eccessiva diffusione nel modello *unsteady*, ed evitare di veder estinguere le *flamelet* seguite, il valore istantaneo della *scalar dissipation* in ciascuna cella è stato limitato ad un valore massimo.

In funzione dei diversi *tests* eseguiti, per un modello a *flamelets* multiple con 40 intervalli di *scalar dissipation* è stato limitato il valore massimo di *scalar dissipation* a 230 [1/s]

- **Courant Number** – Nel definire la probabilità non-stazionaria di trovare una *flamelet* il *time-step* dipende dal *courant number*. Grandi valori del *courant number* implicano piccoli *time-step* per i quali si ha la diffusione di trovare *flamelets* fuori dal dominio di partenza. Questo può però portare ad errori numerici maggiori.

Il *time-step* è stato scelto in base alla lunghezza della camera di combustione, pari a 114 [mm] ed in base al tempo di attraversamento medio che una particella rettilinea impiega a percorrerla supponendola dotata di una velocità pari alla media calcolata nella simulazione RANS *steady flamelet*. Il *time step* è stato poi assunto come 1/100 del tempo di attraversamento del dominio. Si ottiene un valore pari a circa 0,0005 [s].

Con l'impostazione di queste caratteristiche di simulazione sono state avviate le simulazioni *unsteady flamelet* e da esse sono stati estrapolati i dati di emissione relativi all'uscita a camino presentati nelle sezioni successive.

6.1.3 – Simulazioni della combustione con modelli ED ed ED - FR

A differenza del modello *flamelet*, nelle simulazioni eseguite con il modello ED-FR, il calcolo dei prodotti di reazione può avvenire in due possibili modi secondo un sistema a “*switch*” già descritto nel paragrafo 4.2.1; o implementando una cinetica chimica ridotta cella per cella (modello *Finite Rate*) o eseguendo un calcolo che assume la presenza di combustione laddove si raggiunge una buona miscelazione turbolenta.

Per quanto riguarda il calcolo della cinetica chimica sono state predisposte due serie di simulazioni per testare sul singas due *sets* di reazioni di combustione diversi. Nel primo caso è stato implementato il meccanismo chimico ridotto sviluppato da Jones & Linstedt, comprendente sei specie chimiche comprese le specie del combustibile (CH₄, CO, H₂). Il meccanismo di Jones & Linstedt si compone dei quattro *steps* di reazione sotto presentati in tabella 6.1 [32]:

Reaction	Arrhenius rate of reaction
1) $CH_4 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO + 2H_2$	$R_1 = 4.4 \cdot 10^{11} \cdot e^{-\frac{1.256 \cdot 10^8}{RT}} [CH_4]^{0.5} [O_2]^{1.25}$
2) $CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	$R_2 = 3.0 \cdot 10^8 \cdot e^{-\frac{1.256 \cdot 10^8}{RT}} [CH_4][H_2O]$
3) $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	$R_3 = 6.76 \cdot 10^{15} \cdot T^{-1} \cdot e^{-\frac{1.67 \cdot 10^8}{RT}} [H_2]^{0.25} [O_2]^{1.5}$
4) $CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	$R_4 = 2.75 \cdot 10^9 \cdot e^{-\frac{8.37 \cdot 10^7}{RT}} [CO][H_2O]$

Tab 6.1

In particolare è stata trascurata, nella terza reazione, la reazione inversa dai prodotti ai reagenti che causava problemi numerici di vario tipo ed estinzioni di fiamma. Essa non è quindi stata considerata in seguito lasciando solo la reazione diretta.

Nel secondo caso, invece, è stato implementato il meccanismo chimico di Dryer & Glasmann integrato con la reazione globale ad uno *step* idrogeno-aria che però è stato successivamente abbandonato in quanto forniva risultati meno precisi del modello di Jones & Linstedt. L'utilizzo di questo modello di combustione ha messo in evidenza un più rapido tempo di calcolo ma una

simulazione più approssimativa e globale delle specie causata probabilmente dalla drastica semplificazione dei reali meccanismi cinetici ridotti a soli quattro *steps*.

L'utilizzo di entrambi i modelli è stato accompagnato da una fase di *post-processing* per la determinazione dell'entità delle emissioni inquinanti a chimica lenta. In particolare è stato utilizzato l'*NOx post-processing* attivabile in FLUENT che permette la soluzione numerica di un *set* di equazioni esclusivamente mirato alla stima degli *Nox* di tipo termico, *Prompt* e *Fuel NOx* [12].

I risultati in combustione relativi alla simulazione ED.FR con il meccanismo di Jones & Linstedt sono riproposti nella sezione 6.1.4.2. relativa ai risultati di combustione.

6.1.4 – Analisi dei risultati delle simulazioni RANS

6.1.4.1 – Risultati delle simulazioni a freddo

A conclusione del lavoro svolto sulla simulazione della camera di laboratorio si riportano i principali risultati conseguiti con le simulazioni a freddo. Il primo risultato che viene presentato è il campo di moto a freddo (flusso non reagente), simulato nei due casi di portata considerati, ovvero a 150 [Slpm] di aria e a 250 [Slpm] e relativo all'alimentazione con singas [30]:

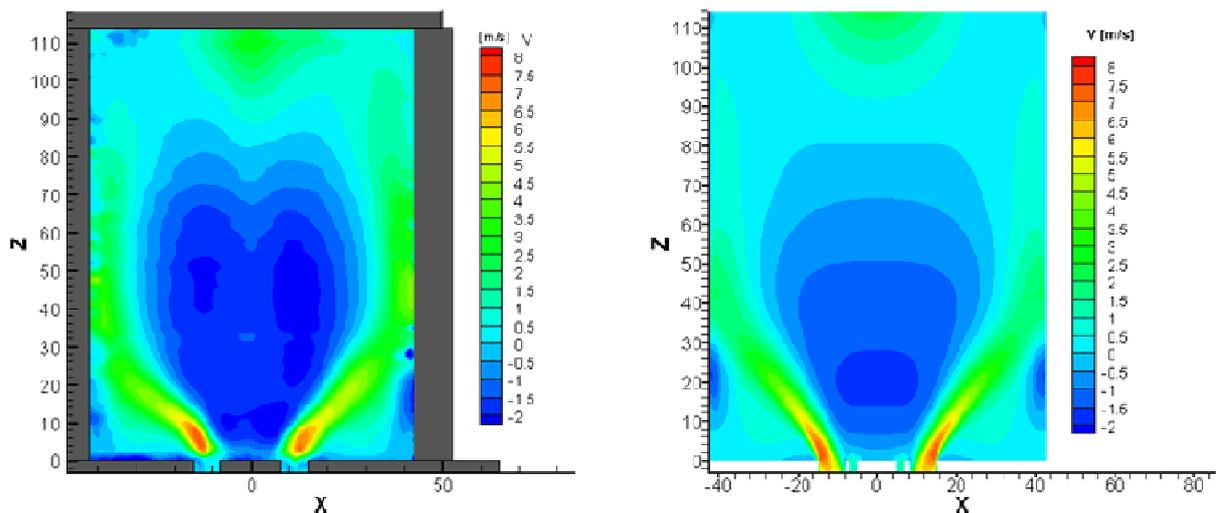


Fig 6.6

Nell'immagine a destra sopra riportata è mostrato il campo di moto a freddo ottenuto dalla simulazione nel caso di portata di aria pari a 150 [Slpm]. L'immagine rappresenta il campo di velocità assiale. Come già spiegato esso è stato ottenuto imponendo un angolo di *swirl* pari a 61° corrispondente ad una velocità tangenziale pari a 1,804 [m/s]. Il modello di turbolenza scelto per simulare le vorticità del fluido è stato il modello *k-ε Standard*, una scelta che è il miglior compromesso fra il tempo computazionale necessario a ultimare la simulazione e la bontà del risultato ottenuto. Prima di scegliere il *k-ε Standard* come modello di turbolenza da adottare sono state studiate le differenze fra questo e gli altri modelli proposti dal codice commerciale FLUENT. In particolare si sono ottenuti ottimi risultati con il modello RSM (*Reynold Stress Model*) che però ha richiesto tempi di simulazione troppo lunghi per poter essere utilizzato anche in fase di simulazione della combustione. Oltre alla distribuzione della velocità assiale è possibile riportare la

distribuzione radiale di velocità che ancora approssima fedelmente quanto riscontrato in via sperimentale. Le immagini sono riportate nella successiva figura 6.7:

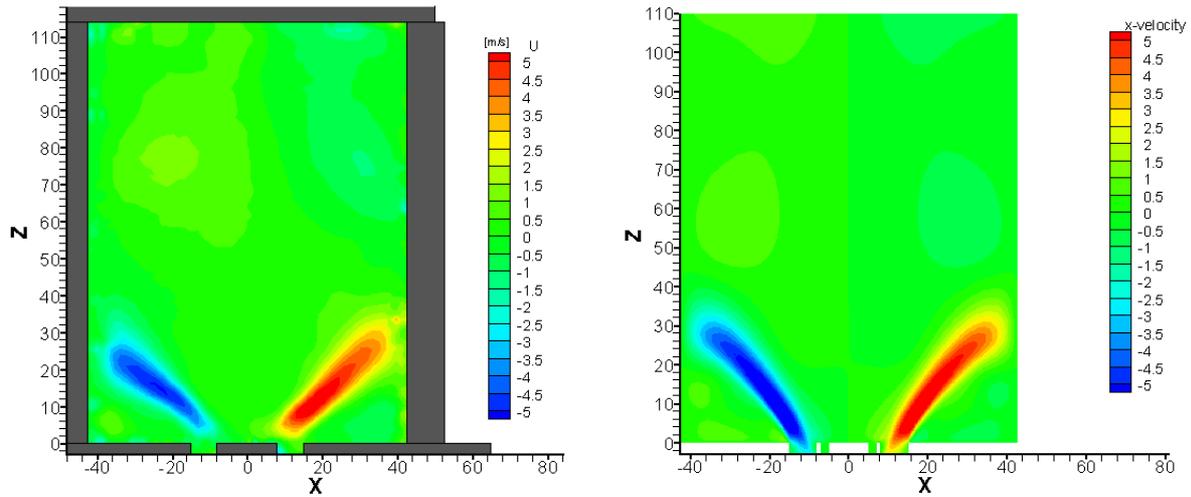


Fig 6.7

Altri dati sperimentali a disposizione per il campo di moto a freddo sono l'estrazione dei profili di velocità su diverse traverse orientate secondo l'asse X e aventi Z variabile fra 3,15,55,95 [mm]. A seguito della simulazione abbiamo, anche nei casi simulati, estratto i profili delle velocità assiali, tangenziali e radiali per verificarne la corrispondenza sulle curve sperimentali viste nel precedente paragrafo 6.1.1. Il risultato è molto soddisfacente e si riportano a dimostrazione i tre profili di confronto fra dati sperimentali e simulazioni a freddo per la traversa Z=3[mm] [30].

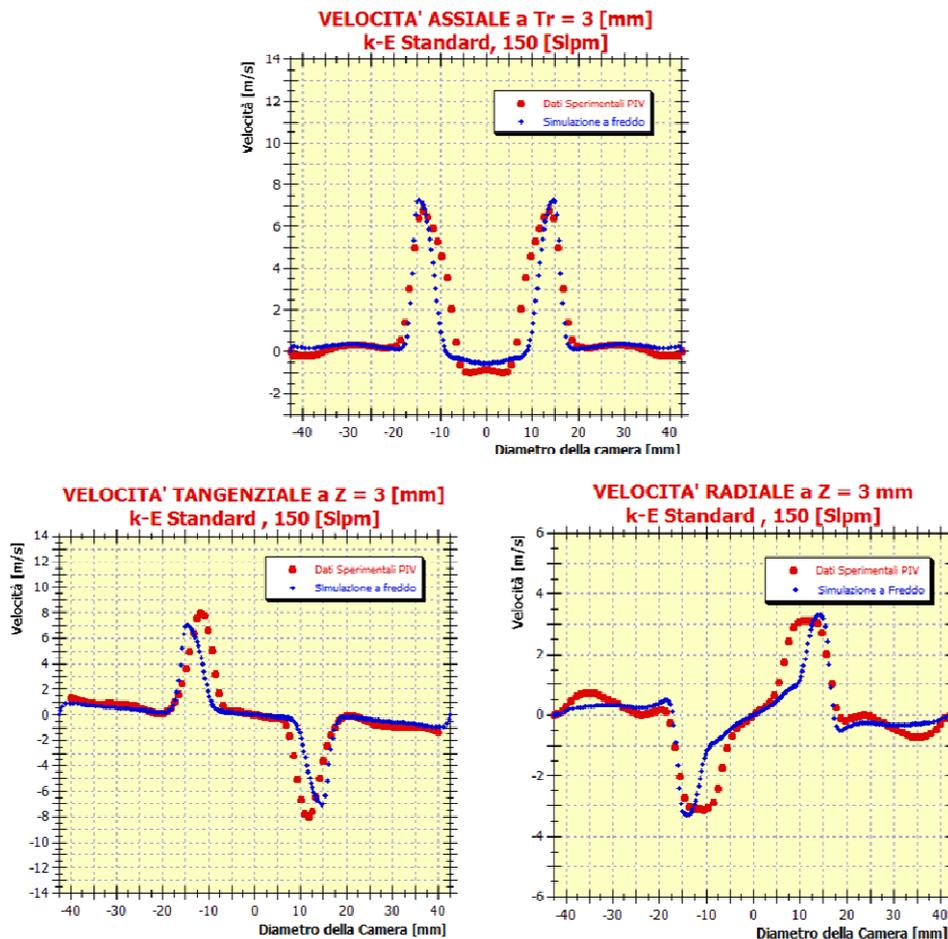


Fig 6.8

Per quanto riguarda il caso simulato con 250 [Slpm] viene riportata la sola immagine di velocità assiale ottenuta con le simulazioni numeriche non essendo attualmente disponibile un confronto diretto con i dati PIV sperimentali:

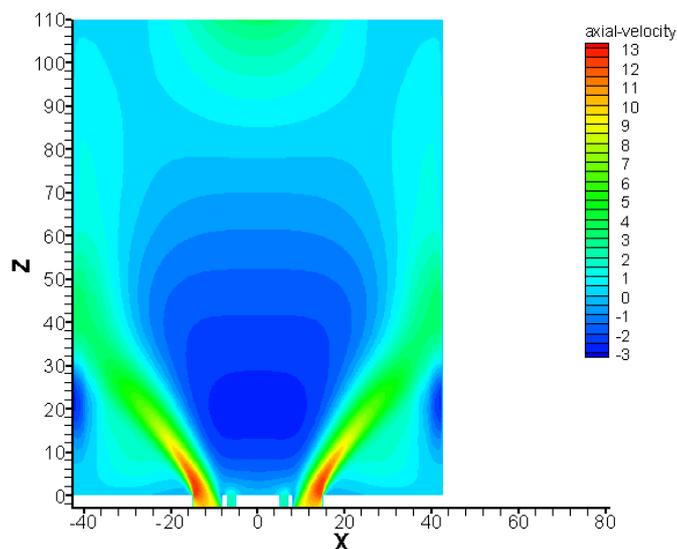


Fig 6.9

Per essa si possono notare valori di velocità all'ingresso dei reagenti molto più elevati di quanto si aveva per il caso 150 [Slpm]. Ovviamente questo è dovuto al considerevole aumento di portata imposto a parità di sezioni di passaggio del fluido. Si nota comunque una ottima distribuzione della zona di ricircolo che consentirà una buona apertura della superficie stechiometrica di fiamma in combustione.

Come detto sopra, la simulazione che porta i migliori risultati a freddo, in termini di velocità assiale è la simulazione eseguita utilizzando come modello di turbolenza il modello *RSM* di cui si riporta a seguito un confronto diretto con i risultati sperimentali e con la simulazione *k-ε*.

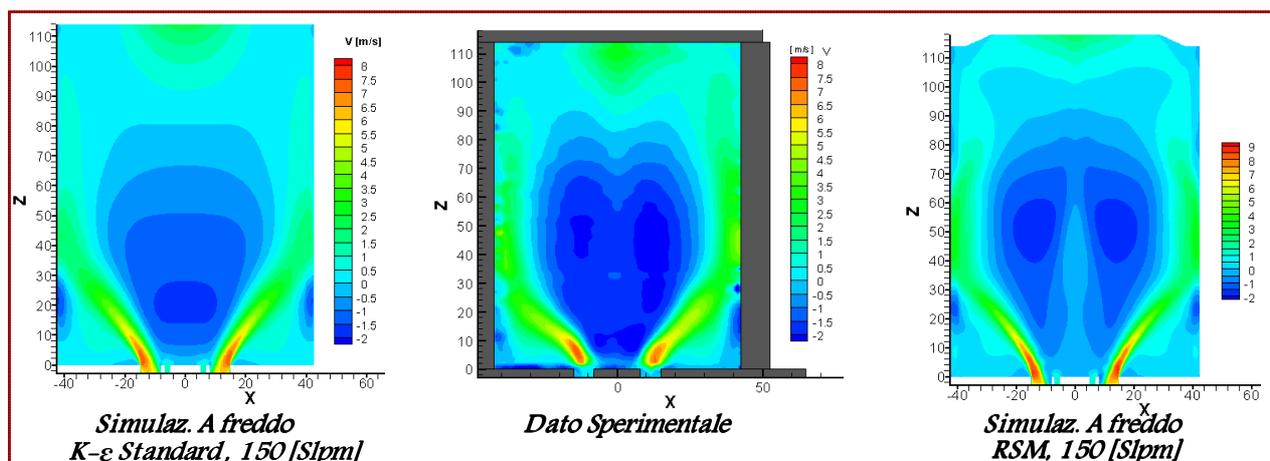


Fig 6.10

In ultimo, per quanto riguarda le simulazioni a freddo, è opportuno presentare i risultati CFD del campo di moto estratti su diversi piani X-Y della camera di combustione, a diverse altezze

muovendosi dalla base verso il camino di espulsione. Anche in questo caso sono a disposizione riscontri sperimentali misurati con una portata di aria pari a 150 [Slpm]. In particolare le immagini mostrano il modulo della proiezione della velocità locale sul piano X-Y di misura [30].

$$\text{Intensità misurata} = \sqrt{u^2 + w^2}$$

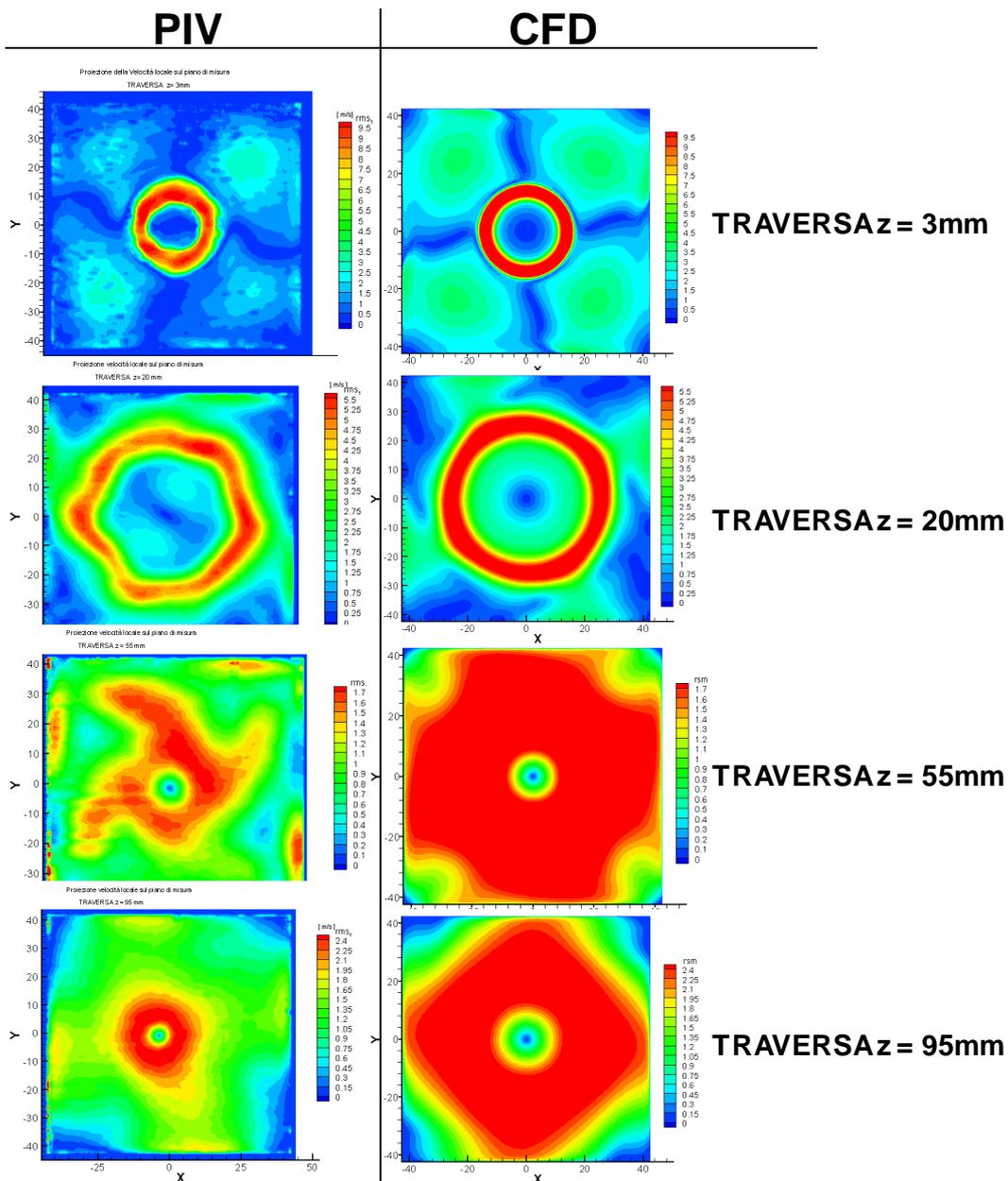


Fig 6.11

Queste immagini mostrano una buona corrispondenza con le misure sperimentali fino a metà camera sovrastimando invece i dati man mano che ci si avvicina all'uscita a camino (da 55mm fino a 95 mm). Tale sovrastima non risulta comunque particolarmente dannosa per le successive simulazioni a caldo in quanto tutta la conformazione di fiamma e il ricircolo dovuto allo *swirl* si svilupperà principalmente nella prima metà del bruciatore ed inoltre perché la componente che maggiormente influisce sulla combustione è la componente assiale che risulta correttamente predetta dal modello $k-\epsilon$. Tale modello sarà quindi utilizzato nelle successive analisi di combustione

6.1.4.2 – Risultati delle simulazioni a caldo

A seguito dell'approfondimento eseguito sulle simulazioni a freddo sono state avviate le simulazioni a caldo (in combustione) delle quali si riportano i più significativi risultati con riferimento ai soli casi di geometria tridimensionale. Infatti prima di eseguire le simulazioni sulla geometria 3D, computazionalmente molto onerose, sono stati testati i diversi modelli di combustione e svariati meccanismi di combustione su geometrie dello stesso bruciatore caratterizzate da due sole dimensioni.

Principalmente, ci si è occupati del modello *Flamelet*, del quale vengono a seguito presentati i risultati del campo di temperatura nelle condizioni di 150 [Slpm] al variare del meccanismo chimico di reazione. La temperatura è presentata estraendo dalla geometria tridimensionale il piano assiale tracciato sulle direzioni X-Z [30].

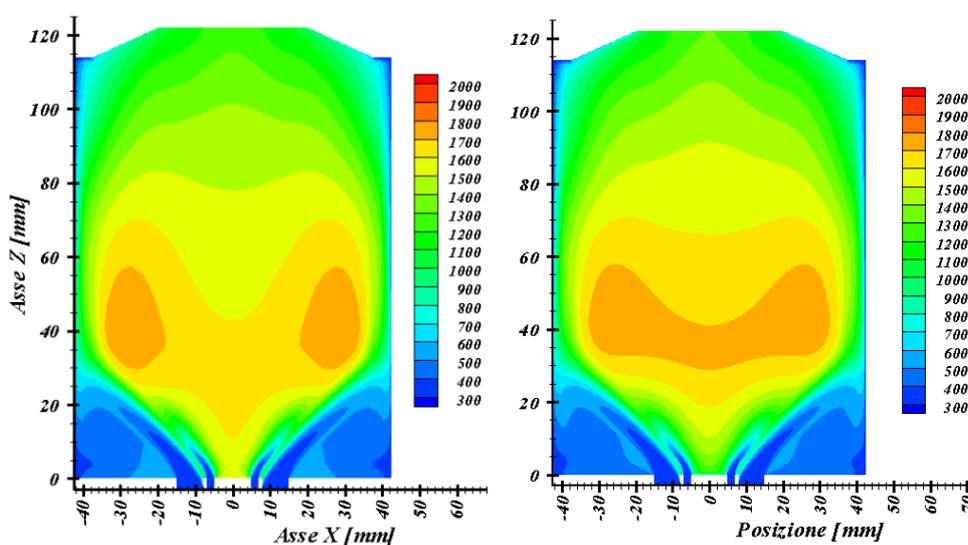


Fig 6.12

Sulla destra è riportata l'immagine della Temperatura per il caso *Steady Flamelet Non-Adiabatico*. In tale simulazione è stato implementato il meccanismo cinetico GRI30 per la simulazione del singas e sono stati considerati anche gli effetti dell'irraggiamento termico dalla fiamma verso le pareti esterne. L'irraggiamento ha però mostrato di non fornire apprezzabili variazioni nel campo di temperatura rispetto alle simulazioni in cui non era attivato. L'immagine sulla sinistra mostra invece il campo di temperatura ottenuto simulando la combustione con il meccanismo SMOOKE 16. Il risultato è un campo di T molto simile a quello ottenuto con il GRI 30 in termini di distribuzione, leggermente più freddo. La similitudine fra le due simulazioni è giustificata dal fatto che il meccanismo SMOOKE è ricavato dal meccanismo GRI30 con una operazione di riduzione chimica del numero di reazioni e di specie considerate lasciando solo quelle che più fortemente incidono sulla chimica di combustione, e togliendo molte specie intermedie contemplate invece nel meccanismo completo GRI30. La simulazione esatta dovrebbe pertanto essere quella di sinistra ma si ottiene una ottima approssimazione nella simulazione con meccanismo ridotto che risulta molto più versatile in termini di tempo di calcolo delle simulazioni e quindi più adatto alle indagini sulle caratteristiche di combustione del singas.

Paragonando questi risultati con il campo di temperatura a caldo ottenuto con il modello EDFR si nota un andamento simile ma una differenza in termini di intensità dei valori di temperatura. Nella successiva figura 6.13 sono rappresentati i due campi di temperatura che differiscono principalmente nella zona centrale della camera. Nella simulazione EDFR (a destra) si ha una zona centrale a minor temperatura. Essa risulta più bassa di circa 200 °C. Una seconda differenza si ha nell'ingresso dei reagenti dove con il Modello *Flamelet* si nota un maggiore riscaldamento nella zona di miscelamento fra combustibile e comburente. L'uscita a camino e la dispersione termica verso le pareti risultano invece pressoché simili.

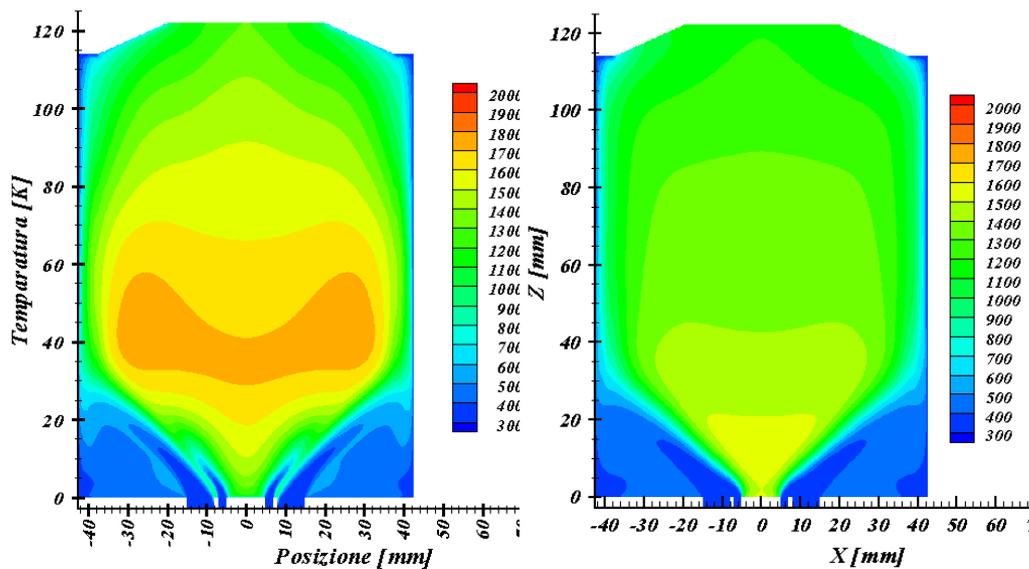


Fig 6.13

Si riportano a seguito le estrazioni dei profili di Temperatura alle traverse di 15, 55, 95[mm] nei tre casi considerati alimentati con singas, aggiungendo anche l'estrazione del profilo di temperatura dalla simulazione con meccanismo GRI 3.0 senza irraggiamento [30]:

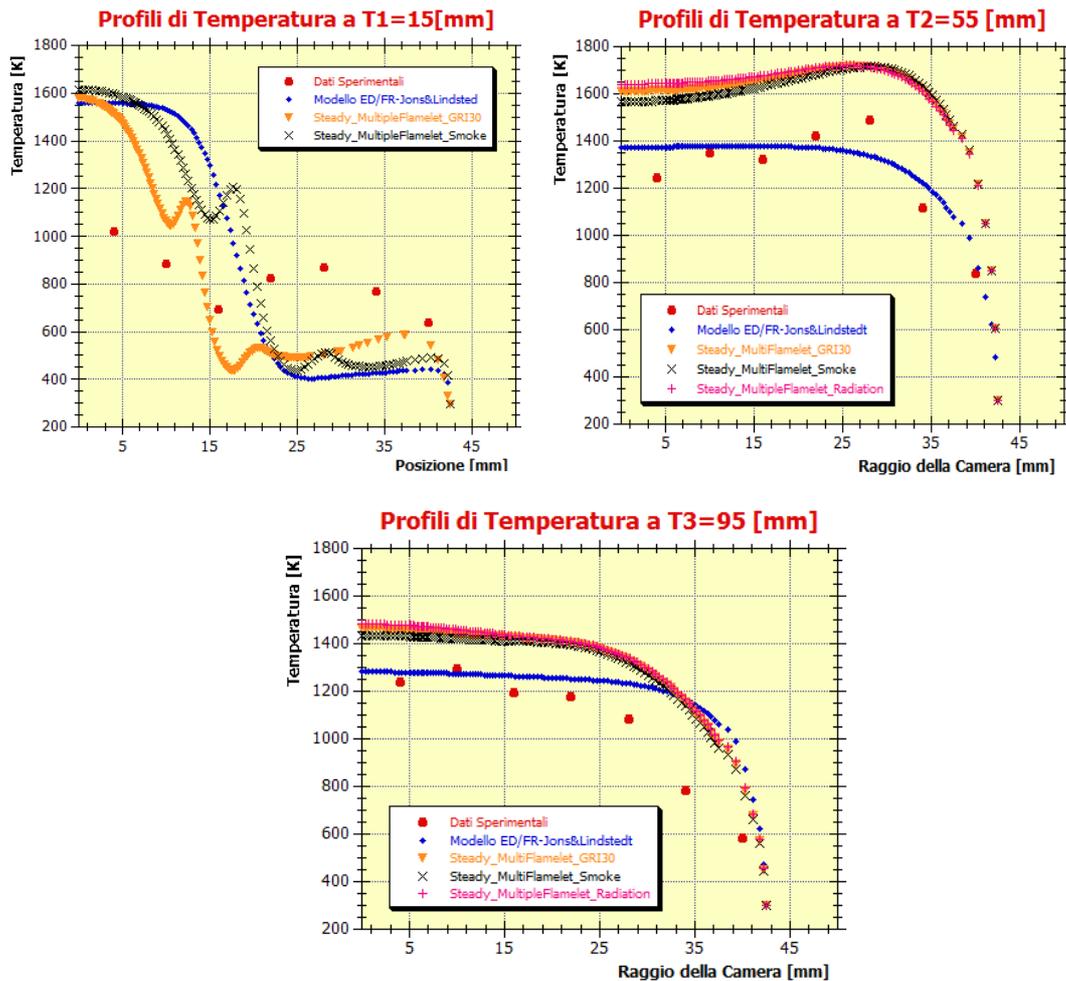


Fig 6.14

Da queste immagini è immediato il confronto dei profili di T e si nota chiaramente la più elevata temperatura raggiunta dai modelli *Flamelet* rispetto al modello *EDFR*. Sono inoltre riportati i profili ottenuti con le misurazioni sperimentali sulla camera di laboratorio. Esse hanno un andamento molto simile ai profili simulati nelle due traverse a 55 e 95 [mm] mentre non si può dire lo stesso per il profilo a 15 [mm]. In quest'ultimo caso infatti si ha una temperatura al cento della camera molto più alta per i tutti i casi simulati. Si riportano, come ultima analisi sulle temperature di combustione, i profili di temperatura presi sull'asse della camera nelle tre simulazioni presentate accompagnate da un grafico che mostra la media della temperatura sulle sezioni della camera di combustione presa su diverse traverse comprese fra l'ingresso dei reagenti e l'uscita a camino:

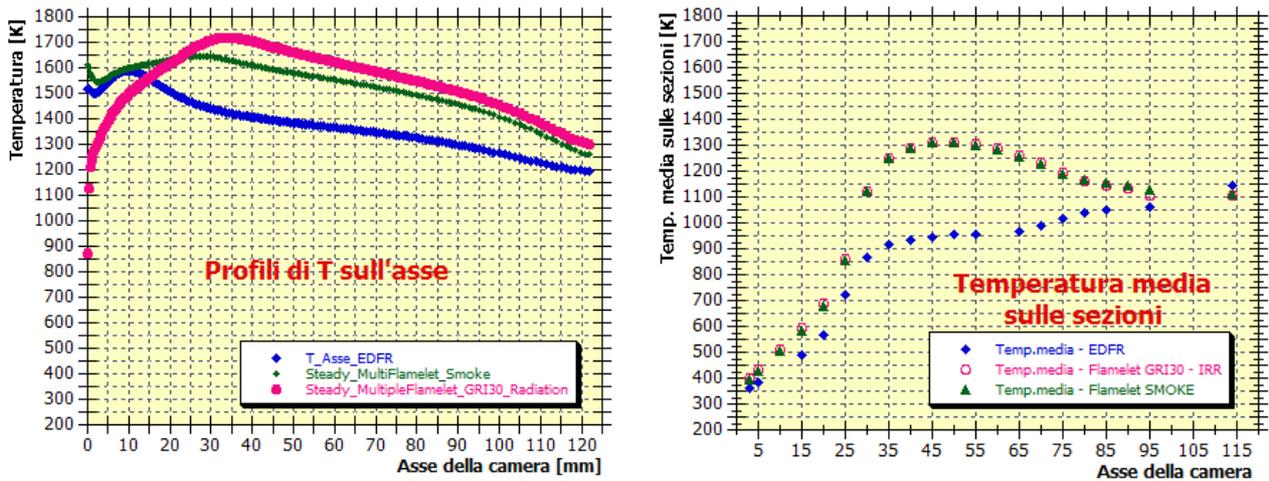


Fig 6.15

In conclusione si ha un anomalo comportamento della temperatura vicino all'ingresso dei reagenti predetta dal modello *Flamelet*. Migliore è invece il risultato ottenuto utilizzando il modello *EDFR* che in questa zona presenta risultati più corretti. Probabilmente, l'errore predetto nel caso *Flamelet* è imputabile a non corrette valutazioni del campo della frazione di miscela e della sua varianza che causano, con la lettura delle *look-up table* pre-processate associazioni errate ai valori della temperatura. Parte di questo può inoltre essere imputabile ad errori sulla distribuzione del campo di moto, da cui la frazione di miscela dipende, che sarà infatti corretta in parte con simulazioni del tipo *LES*.

Per completezza è stata riportata la distribuzione delle principali specie interessanti dal punto di vista della combustione. Occorre sempre controllare queste distribuzioni per catturare eventuali errori nelle simulazioni o per accertarne la correttezza fisica.

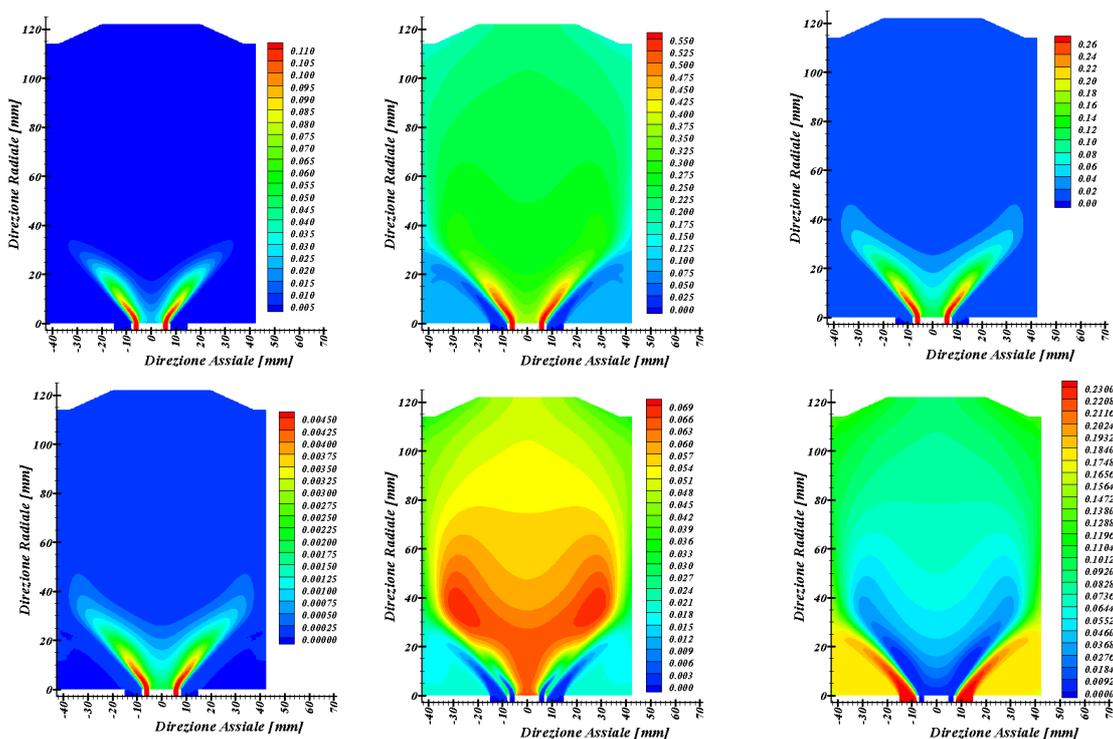


Fig 6.16

Sempre con riferimento ai test di combustione del singas sono state eseguite anche le simulazioni relative al caso di alimentazione del bruciatore con 250 [Slpm] di aria. In tali casi si ottengono profili di temperatura paragonabili a quelli ottenuti nel caso 150 [Slpm] a causa del fatto che le portate sono calcolate per ottenere in camera lo stesso rapporto di equivalenza medio e pertanto temperature di combustione paragonabili. Pertanto si riportano esclusivamente i profili di temperatura ottenuti alle traverse del bruciatore passanti per 55 [mm] e 95 [mm] visibili in figura 6.17:

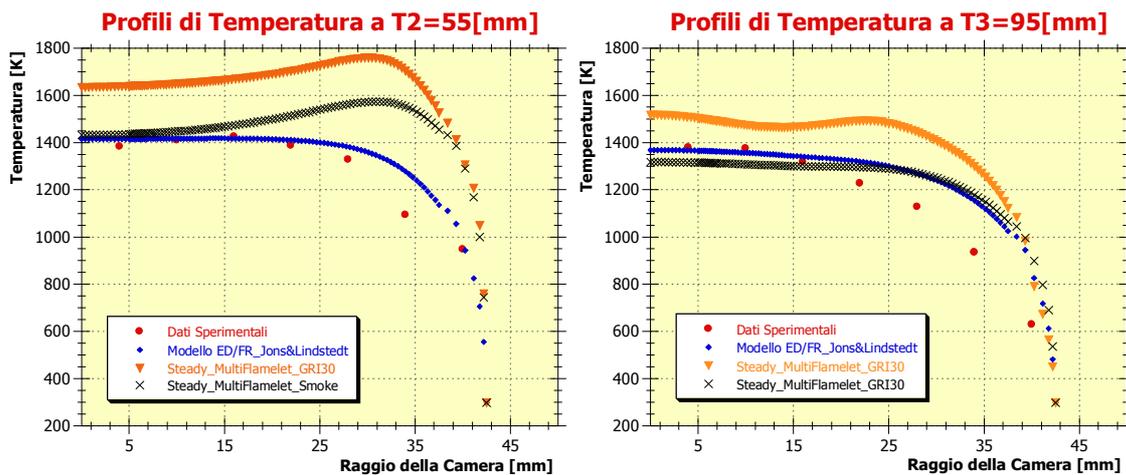


Fig 6.17

6.1.4.3 – Emissioni inquinanti

In questo paragrafo si riportano i risultati ottenuti per alcune fra le principali emissioni inquinanti quali CO, CO₂ ed NO_x. Così come fatto per la temperatura, sono state estratte le immagini bidimensionali XZ della frazione in massa delle varie specie inquinanti ed i relativi profili sulle traverse a 15, 55 e 95 [mm]. Si riportano quindi gli andamenti del CO per le tre simulazioni prese in considerazione. Va sottolineato che per l'analisi delle emissioni inquinanti è d'obbligo prendere in esame il modello *Unsteady Flamelet* al posto del modello *Steady*. E' infatti noto che con i modelli *Steady Flamelet* si potrebbero ottenere valori nelle frazioni in massa dei prodotti di combustione errati e fino ad un ordine di grandezza maggiori. Perciò le simulazioni considerate al fine di esaminare le emissioni inquinanti sono state la simulazione *Unsteady Flamelet* con meccanismo GRI30 + Irraggiamento, la simulazione *Unsteady Flamelet* con meccanismo SMOKE 16 e la simulazione *EDFR*.

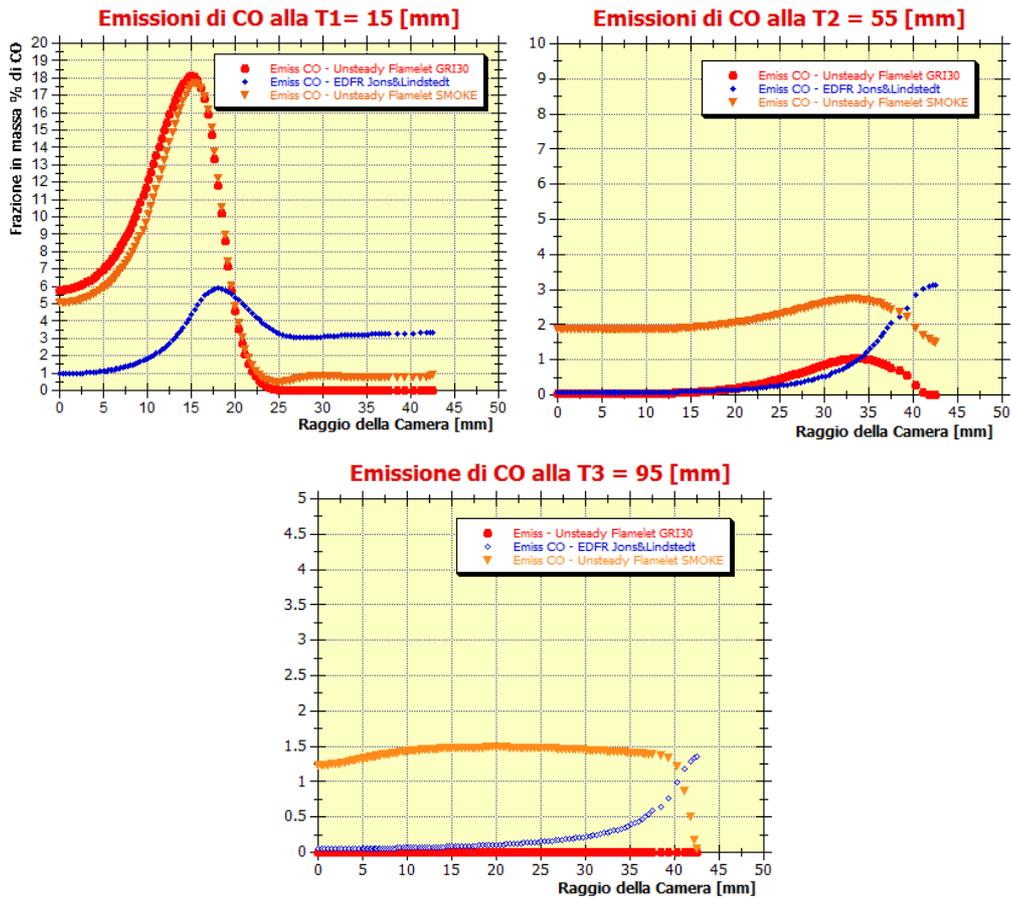


Fig 6.18

Questi profili di emissione sono stati estratti dalle seguenti immagini di figura 6.19, che mostrano la distribuzione del monossido di carbonio come risultato delle simulazioni:

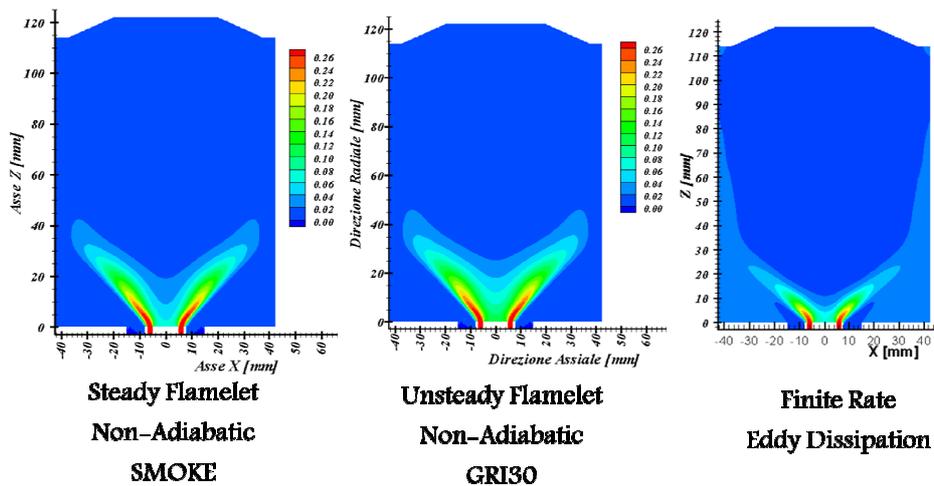


Fig 6.19

L'elevata emissione di CO vicino all'ingresso del combustibile è ovvia. In una combustione di CH_4 non sarebbe presente ma simulando combustioni di singas il CO è un reagente che prende parte

all'ingresso in camera con una frazione in massa pari al 27% sul totale. All'ingresso si ha cioè il massimo contenuto in massa di CO che entrando nella zona di reazione viene ossidato completando la sua trasformazione in CO₂. I modelli *Flamelet* (rappresentati in figura) simulano una emissione di CO avente una uguale propagazione in camera con intensità di emissione leggermente diverse. La simulazione con il meccanismo SMOKE evidenzia emissioni di CO maggiori alla simulazione con il GRI30, man mano che ci si avvicina all'uscita a camino. Il modello EDFR invece prevede la formazione di CO in prossimità delle pareti. La formazione di CO in questa posizione (si notino i profili nelle traverse a 55 e 95 mm) si possono intendere come fenomeni di *quenching*, ovvero aree normalmente lontane dall'ingresso dell'ossidante dove il CO non riesce a trovare la giusta quantità di ossigeno per bruciare e completare l'ossidazione a CO₂.

Relativamente all'emissione di NO si riporta un grafico relativo alla simulazione Unsteady Flamelet condotta con il meccanismo GRI 3.0 con Irraggiamento. Questo grafico mette in evidenza il profilo dell' NO sull'asse della camera di laboratorio ed esprime l'emissione in parti per milione “*volume dry*”:

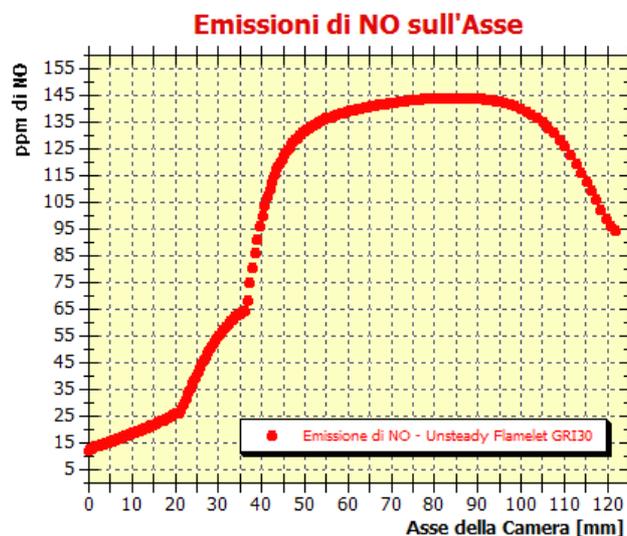


Fig 6.20

Dall'andamento della curva si nota che l'emissione massima di NO si ha utilizzando il modello *Flamelet*, laddove la temperatura di combustione risulta massima. Il calo di temperatura in uscita dalla camera di laboratorio porta ad una considerevole riduzione dell'emissione assestandosi in uscita ad un valore emissivo pari a 95 ppm al 15%O₂. Per questo andamento non è attualmente a disposizione un confronto con i dati sperimentali, assenti lungo l'asse della camera. L'analisi compiuta sulla simulazione EDFR è stata invece condotta utilizzando il *post-processing* degli NO_x proposto da FLUENT. In questo caso le temperature di combustione considerevolmente più basse portano ad una emissione di NO termici molto minore di quelle predette nel caso Unsteady Flamelet dovuta alla considerevole diminuzione di NO_x termici prodotti in un campo di moto relativamente più freddo.

Si conclude con i profili di emissione di CO₂:

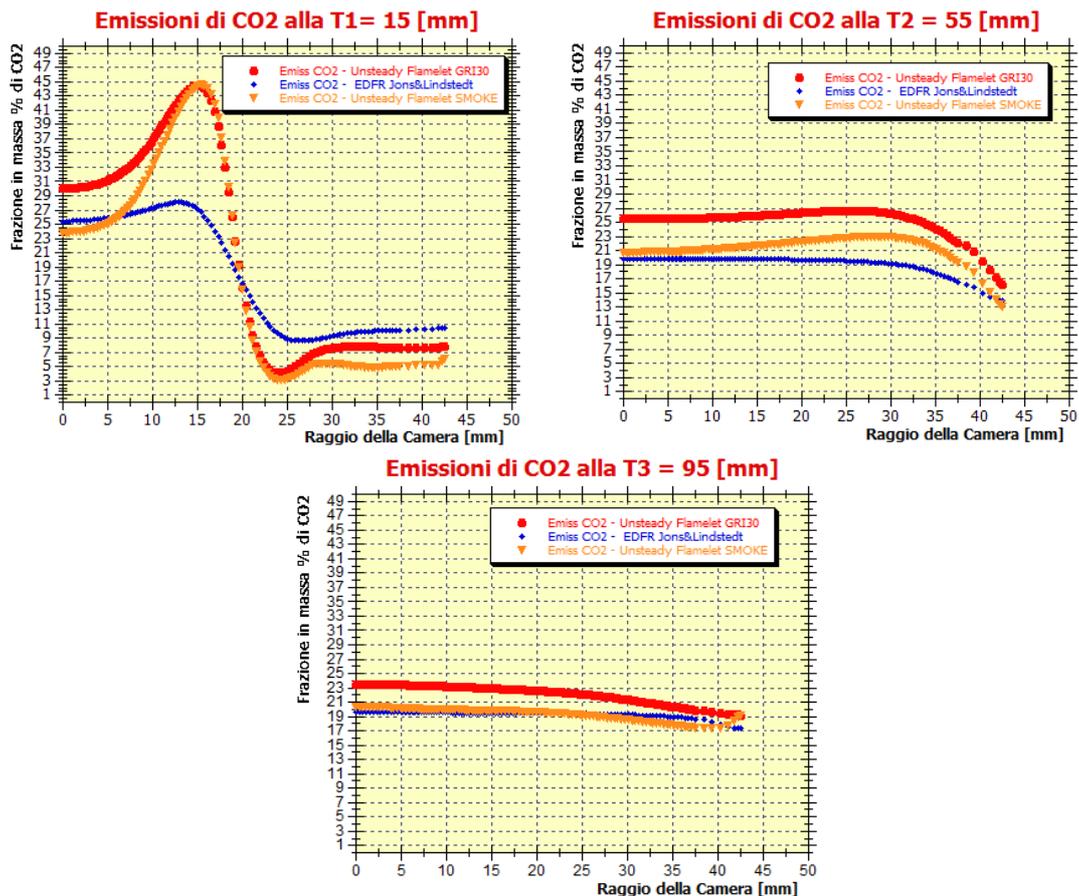


Fig 6.21

L'analisi delle emissioni di CO₂ sulle tre traverse mette in luce un elevato picco di questa emissione sulla traversa a 15 [mm] imputabile al fatto che la CO₂ è un reagente della miscela singas di partenza, introdotto in camera di combustione con una frazione in massa pari a 56,2% del combustibile introdotto. Il picco massimo a 15 [mm] si assesta al 45 % circa nei casi *Flamelet* dimostrando come fra il valore di ingresso e il valore a 15 [mm] si abbia una diffusione di anidride carbonica verso la parte centrale e, in minor misura, verso la parte esterna della camera di combustione. L'emissione individuata sulla stessa traversa dal modello EDFR invece rileva un picco molto minore (tale minore quantità si ha anche nell'emissione di CO) e queste minori frazioni in massa di CO₂ e CO sembrerebbero troppo diffusive rispetto ad un ingresso del 56,2 % di CO₂. Nelle traverse a 55 e 95 [mm] i tre modelli simulati tendono ad essere concordi e tendono ad unico valore emissivo a camino individuabile al circa 24% in massa di emissione di CO₂. Fra la traversa a 55 [mm] e quella a 95 [mm] si ha un leggero incremento della media di CO₂, sintomo della trasformazione di CO in CO₂ secondo un corretto avanzamento della combustione.

Come ultimo risultato, sicuramente il più importante nella trattazione delle emissioni inquinanti, si riportano le emissioni sulla sezione di uscita del bruciatore. Tale sezione, come spiegato nel capitolo 5 è posta a 114 cm dalla base della camera di combustione e permette l'accesso dei fumi di scarico a camino. Il camino non è stato considerato nella griglia di calcolo ma le frazioni in volume che si hanno in questa sezione non cambiano sensibilmente muovendosi verso l'uscita in atmosfera in quanto non si hanno, nel camino di uscita, ulteriori ingressi d'aria o di fumi. Si riporta quindi la tabella indicante i valori delle frazioni in massa degli inquinanti in uscita come media pesata sul

flusso di massa nella sezione di output. I valori predetti dal codice di calcolo da entrambi i modelli di combustione sono quelli di tabella 6.1 [30]:

Combustion model	ED-FR (J. & L.)	Flamelet (GRI 3.0) radiation	Flamelet (GRI 3.0) No rad.	Flamelet (Smooke)
CO(ppm _{vd} 15% O ₂)	1399	8.2	6.6	7.5
NO(ppm _{vd} 15% O ₂)	0.001	98	112	0.01
CO ₂ (% vol. dry)	13.9	14.7	14.8	14.2
H ₂ O (% vol.)	7.6	7.5	9.2	7.3
O ₂ (% vol. dry)	10.1	10.2	10.2	10.2
T (K)	1146	1112	1119	1107

Tab 6.1

In essi sono già state ricavate le emissioni espresse in parti per milione volume dry al 15 % di ossigeno con l'utilizzo degli ulteriori dati di frazione in volume di H₂O dispersa nei fumi e di ossigeno misurati nelle simulazioni.

6.2 Simulazione LES

6.2.1 – Scelte adottate nella simulazione

La simulazione LES è stata impostata partendo dalla simulazione RANS di combustione precedentemente realizzata [33]. La distribuzione di temperatura predetta dalla simulazione mediata secondo Reynolds è stata cioè utilizzata come “*patch* di accensione” della simulazione LES per aiutare la convergenza dei calcoli nei primi passi della simulazione tempo-dipendente in quanto non si aveva necessità di studiare il transitorio di accensione di fiamma.

Ovviamente un procedimento di questo tipo porta ad un condizionamento dei risultati in tutti i passi temporali iniziali della simulazione. Si avrà infatti che partendo dalla distribuzione media nel tempo di tutte le grandezze fisiche, la soluzione introdurrà ad ogni passo temporale gli effetti fluttuanti dei vortici direttamente simulati. Questo allontanerà progressivamente la soluzione dalla configurazione RANS.

Tutti i primi istanti di tempo della simulazione saranno scartati. Essi infatti rappresentano un transitorio di un fenomeno non fisico ma imposto per aiutare la convergenza del calcolo.

Il *time step* è stato scelto in modo da essere pari a circa un centesimo del tempo che una particella impiega nell'attraversamento assiale medio della camera di combustione. Le equazioni sono integrate per un numero di *time-steps* pari a circa quattro tempi di attraversamento utilizzando come risultati solo quelli derivanti dagli ultimi tre tempi di attraversamento. Ovviamente sarebbe necessario aumentare molto di più il numero di iterazioni aumentando di molto i tempi di

attraversamento simulati [34]. Questo non è stato possibile in questa fase visti gli elevati tempi di calcolo richiesti.

Per scegliere il numero di passi temporali da scartare ci siamo appoggiati ad un semplice ragionamento. E' stato stimato il tempo medio che una particella reagente impiega ad attraversare l'intera camera di combustione. Questo tempo si ottiene utilizzando i dati di partenza della simulazione e i dati misurati nel calcolo RANS:

Velocità assiale media RANS di attraversamento camera:

$$u = 1,71 \left[\frac{m}{s} \right]$$

Lunghezza assiale di attraversamento camera:

$$s = 114[mm] = 0,114[m]$$

Se ne ricava il tempo totale di attraversamento medio:

$$t = \frac{s}{u} = 0,0677[s]$$

Se una particella entrante attraverso i condotti di adduzione dei reagenti, attraversa mediamente la camera di combustione in 0,0677 secondi, conoscendo il *time-step* della simulazione saranno univocamente determinate il numero approssimativo di iterazioni transitorie da scartare.

$$t_s = 0,0005[s]$$

$$N_{trans} = \frac{t}{t_s} = \frac{0,0677}{0,0005} = 135[iterazioni]$$

Come linea di principio si è perciò scelto di scartare almeno le prime 135 iterazioni di calcolo. Infatti durante questi passi temporali viene simulato il primo attraversamento di camera di una particella introdotta al tempo zero. Durante questo tempo si può fisicamente immaginare che le nuove particelle in ingresso alla camera di combustione vadano gradualmente ad eliminare la soluzione stazionaria RANS. Normalmente anche dopo il primo attraversamento di camera è possibile che la soluzione presenti ancora fenomeni transitori, sicuramente meno influenti, che possono essere eliminati escludendo altri passi temporali oltre ai primi 135. Questa scelta dipende in genere dal numero totale di iterazioni che costituiscono la simulazione. Quanti maggiori sono i passi temporali computati quante più iterazioni iniziali si potranno escludere senza decurtare informazioni importanti.

Queste dimensioni e i ragionamenti presentati sono essenziali per cogliere la qualità della simulazione. E' ovvio che essa dipende dalla potenzialità di calcolo e dai tempi a disposizione ma anche in mancanza di essi, eliminando con il filtro LES molte informazioni importanti, è opportuno sapere se la simulazione fornirà un'analisi sufficientemente approfondita dei vortici considerati o se invece gli strumenti consentono solo una rappresentazione sommaria.

6.2.2 – Descrizione ed impostazioni della simulazione

Nel paragrafo 2.3.2 sono state descritte le funzioni del *box filter* nell'operazione di filtraggio LES e sono state individuate le modalità operative di questo filtro che si appoggia, per selezionare i vortici da tagliare alla dimensione Δ delle celle che compongono la griglia [4]. La metodologia che consente di scegliere correttamente Δ è quella di stimare le dimensioni approssimative del più grande vortice inerziale e dei più piccoli vortici appartenenti alla scala di Kolmogorov [2]. La conoscenza di questi due valori, se pur approssimativa, è importantissima perchè delimita superiormente ed inferiormente la taglia del filtro. In realtà la buona prassi richiede di risolvere direttamente tutte le scale che vanno dal più grande vortice fino a spingersi all'interno del sottointervallo inerziale (*inertial subrange*) che è arbitrariamente identificato con tutto l'insieme dei vortici aventi dimensione maggiore di $\ell_0/6$ [33][34]. Questa prassi assicura la soluzione diretta dei vortici contenenti la maggior parte dell'energia cinetica turbolenta. Per questo la taglia del filtro è stata scelta in un intervallo al limite identificato da:

$$\eta \leq \ell_{cut-off} \leq \ell_0/6$$

La taglia del vortice di maggiori dimensioni è dettata da considerazioni geometriche sul dominio computazionale studiato; il vortice più grande che si può osservare in camera è infatti prodotto dall'ingresso anulare swirlato dell'aria comburente. All'immediato ingresso in camera, il macrovortice ha le dimensioni del raggio esterno della corona circolare di ingresso aria. La lunghezza L del diametro di questo ingresso viene assunto come dimensione geometrica caratteristica del vortice più grande. La lunghezza L è stata misurata sulla geometria:

$$L = 30[mm]$$

In questo caso la dimensione geometrica L coincide con la dimensione del vortice più grande, ℓ , che può essere espressa anche in termini di numero d'onda come [2]:

$$\lambda_\ell = \frac{2 \cdot \pi}{\ell_0/6} = \frac{2\pi}{0,030/6} = 1,257[Hz]$$

Conoscendo la lunghezza caratteristica ed il vettore velocità di ingresso, è stata fatta una stima del numero di Reynolds del flusso all'ingresso in camera pari a:

$$Re = \frac{v \cdot L}{\nu} = \frac{10,6 \cdot 0,030}{1,45 \cdot 10^{-5}} = 21,931$$

Dalle note relazioni derivanti dalla teoria di Kolmogorov è stata eseguita la stima della dimensione della scala di Kolmogorov:

$$\eta \cong \frac{\ell}{(Re)^{3/4}} = \frac{30}{(21,931)^{3/4}} = 0,0166[mm]$$

che può essere espressa anche in termini di numero d'onda come:

$$\lambda_\eta = \frac{2 \cdot \pi}{\eta} = \frac{2\pi}{0,0166 \cdot 10^3} = 378'505[\text{Hz}]$$

L'intervallo all'interno del quale scegliere la frequenza di taglio deriva allora dalle espressioni precedenti in termini di numero d'onda :

$$\eta \leq \ell_{cut-off} \leq \ell_0/6 \quad \rightarrow \quad \lambda_\ell \leq \lambda_{cut-off} \leq \lambda_\eta$$

$$0,0166[\text{mm}] \leq \ell_{cut-off} \leq 30[\text{mm}] \quad \rightarrow \quad 1'257 \leq \lambda_{cut-off} \leq 378'505$$

Come già ricordato più volte, nel caso del *box-filter* utilizzato in questa simulazione, la lunghezza caratteristica di taglio coincide con la dimensione media delle celle di calcolo, $\ell_{cut-off} = \Delta$. In funzione del Δ risulta univocamente determinato il numero di celle N (di lati medi pari a Δ) necessarie per rappresentare il vortice più grande e viceversa dato N si ricava univocamente il valore di Δ secondo la relazione:

$$\ell = \Delta \cdot N$$

Generalmente, considerando una griglia con dimensione media delle celle pari a Δ , il valore di $N = \ell/\Delta$ assume valori compresi in un ben definito intervallo.

Il primo estremo dell'intervallo si ottiene simulando direttamente un vortice di taglia η , questo richiede che non avvenga alcun filtraggio, ovvero:

$$\Delta \leq \eta \quad \rightarrow \quad N = \ell/\Delta \quad \rightarrow \quad N = \ell/\eta = 30/0,0166 = 1'807[\text{celle}]$$

Questa condizione rappresenta la migliore simulazione realizzabile, caratterizzata da Δ minimo ed N massimo, che prende il nome di *Direct Numerical Simulation* (DNS).

Il secondo estremo dell'intervallo si individua laddove nessuna scala di lunghezza venga direttamente risolta. Si otterrà una dimensione della cella minima capace di contenere il più grande vortice:

$$\Delta \leq \ell \quad \rightarrow \quad N = 1[\text{cella}]$$

In questo caso si ha Δ massimo ed N minimo.

La simulazione LES viene scelta in un caso intermedio fra i due estremi discussi. Si individuano la taglia della cella Δ ed il numero di celle N nelle quali si vuole dividere la lunghezza ℓ . Quanto più aumenta N e diminuisce Δ tanto più affinata sarà la simulazione LES.

Fissato un valore di N nell'intervallo:

$$1 < N < \ell/\eta \quad \rightarrow \quad 1 < N < 1'807$$

si otterrà una simulazione tanto più precisa quanto più N si avvicina al limite della simulazione DNS.

Relativamente alla simulazione presentata in questo lavoro è stata fatta un'attenta valutazione sulla taglia del filtro per ottenere una simulazione rappresentativa della realtà, anche se infine non ci si è potuti spingere a valori elevati della frequenza di taglio a causa dell'enorme tempo computazionale che ne sarebbe derivato. Dopo alcune prove preliminari si è giunti alla seguente scelta:

$$N = 100 = \ell/\Delta \quad \rightarrow \quad \Delta = \ell/N = 30/100 = 0,3[mm]$$

Questa scelta ha consentito di determinare il numero totale di celle in cui dividere il dominio computazionale della camera di combustione in esame. La simulazione riguarda l'intero dominio tridimensionale della camera sperimentale di laboratorio che presenta le seguenti dimensioni:

$$x = 85[mm]$$

$$y = 85[mm]$$

$$z = 114[mm]$$

da cui è stata scelta una dimensione media della cella pari a $0,3[mm]$ ottenendo infine i seguenti numeri di celle nelle tre direzioni spaziali della geometria:

$$N_x = N_y = 230[mm]$$

$$N_z = 192[mm]$$

Si parla di dimensione media delle celle in quanto si è scelto di eseguire infittimenti più concentrati nella zona di fiamma e ai bordi del dominio, realizzando invece *mesh* più rade nelle zone prossime all'uscita a camino.

6.2.3 – Risultati della simulazione LES. Confronto con i risultati RANS e sperimentali

Il principale risultato della simulazione è quello di ottenere i tre profili di temperatura corrispondenti a tre traverse della camera di combustione per le quali sono a disposizione anche i corrispondenti valori sperimentali. Le traverse in questione, come specificato relativamente alle simulazioni RANS e nel capitolo 5.1, si trovano a 15 mm , 55 mm e 95 mm dalla base interna del bruciatore. Nel prototipo di camera, a queste altezze dalla base sono previste le opportune sonde di misura sperimentale [29].

Il profilo di temperatura è ottenuto come media di tutti i profili corrispondenti a ciascun *time-step* della simulazione LES. Negli stessi grafici dove è presentata questa curva risultante, sono stati sovrapposti i profili di temperatura ottenuti con le simulazioni di combustione RANS.

Relativamente alla traversa posta a 15 mm si hanno i seguenti profili di temperatura [33]:

SIMULAZIONE LES A CALDO A 15 mm Temperatura con Syngas e GRI30

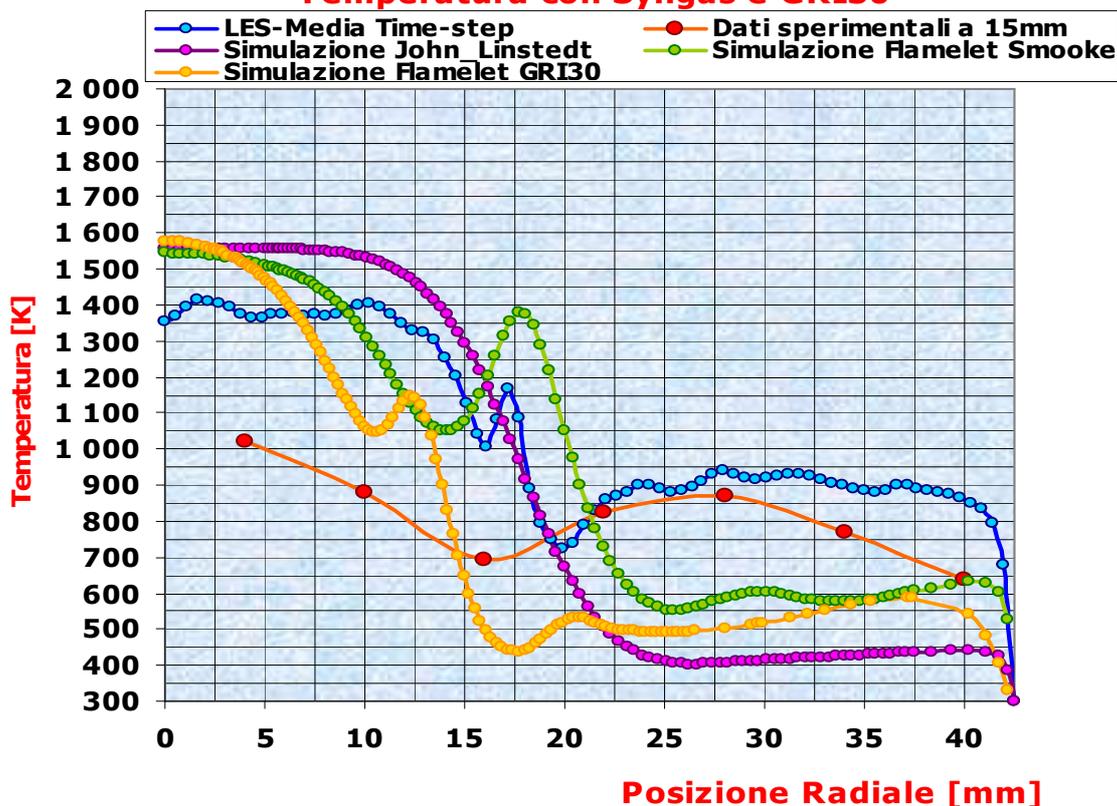


Fig 6.22

Analizzando i risultati proposti in questo primo grafico si nota che il profilo di temperatura risultante dalla simulazione LES presenta un andamento migliore rispetto ai risultati RANS relativamente al confronto con i dati sperimentali (presentati in rosso). In particolare, alla traversa corrispondente a 15 mm si ha un miglioramento della temperatura di combustione all'asse della camera che seppur sovrastimata presenta un miglioramento rispetto alle altre simulazioni presentate. Mentre tutti i modelli RANS mostrano una temperatura assiale di 1550 [K] la simulazione LES riporta un abbassamento di 200 [K] circa. Inoltre, tutto l'andamento del profilo di temperatura a 15 mm ripropone lo stesso andamento della curva sperimentale pur permanendo la sovrastima di temperatura nell'approssimarsi all'asse del bruciatore. Nella parte esterna della camera che va dai 20 [mm] di raggio fino alla parete esterna si ha un'ottima corrispondenza del profilo LES con il profilo sperimentale, laddove invece tutti i risultati di combustione RANS sottostimano fortemente i valori di temperatura.

Come secondo risultato si riporta a seguito il profilo di temperatura corrispondente alla TRAVERSA 55 mm [33]:

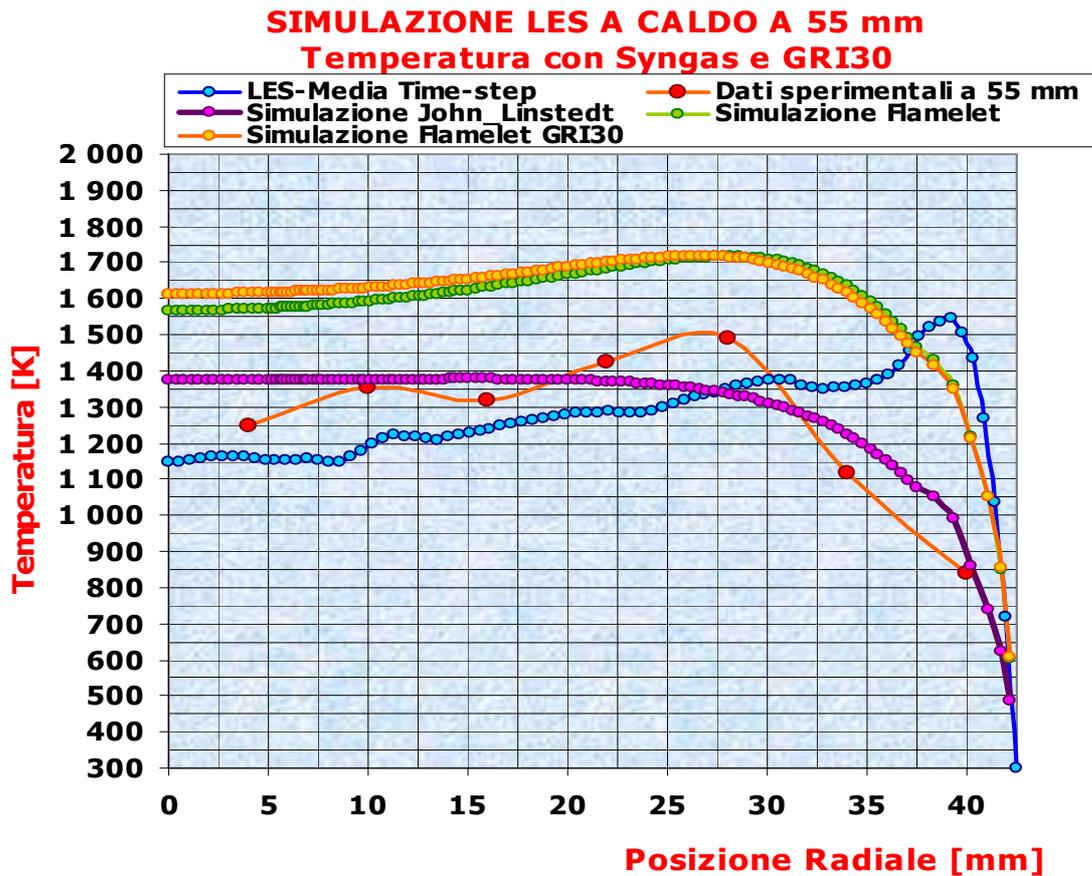


Fig 6.23

La seconda traversa in esame mostra i profili di temperatura posti alla mezzeria della camera di combustione. Il profilo sperimentale possiede valori di temperatura mediamente ben rappresentati dalla simulazione RANS realizzata con il meccanismo a quattro *steps* di John&Linstedt. La simulazione LES qui sovrapposta presenta un miglioramento sull'andamento del profilo che, come nel caso sperimentale, si porta da un valore di temperatura più basso a centro camera verso valori più elevati all'esterno. Non si ha invece un buon riscontro nella parte esterna del profilo LES che sembra ipotizzare elevate temperature a parete che nei casi RANS e sperimentali non si hanno. Questo effetto di diffusione e sovrastima esterna della temperatura può essere imputabile all'assenza di specializzati modelli di sottogriglia per la simulazione a parete il cui utilizzo è caldamente consigliato in letteratura. Nel complesso comunque la simulazione LES predice un discreto profilo di temperatura eliminando i difetti riscontrati nelle simulazioni di combustione con modello *Flamelet* di tipo RANS.

In ultimo si riporta il profilo di temperatura corrispondente alla TRAVERSA 95 mm [33]:

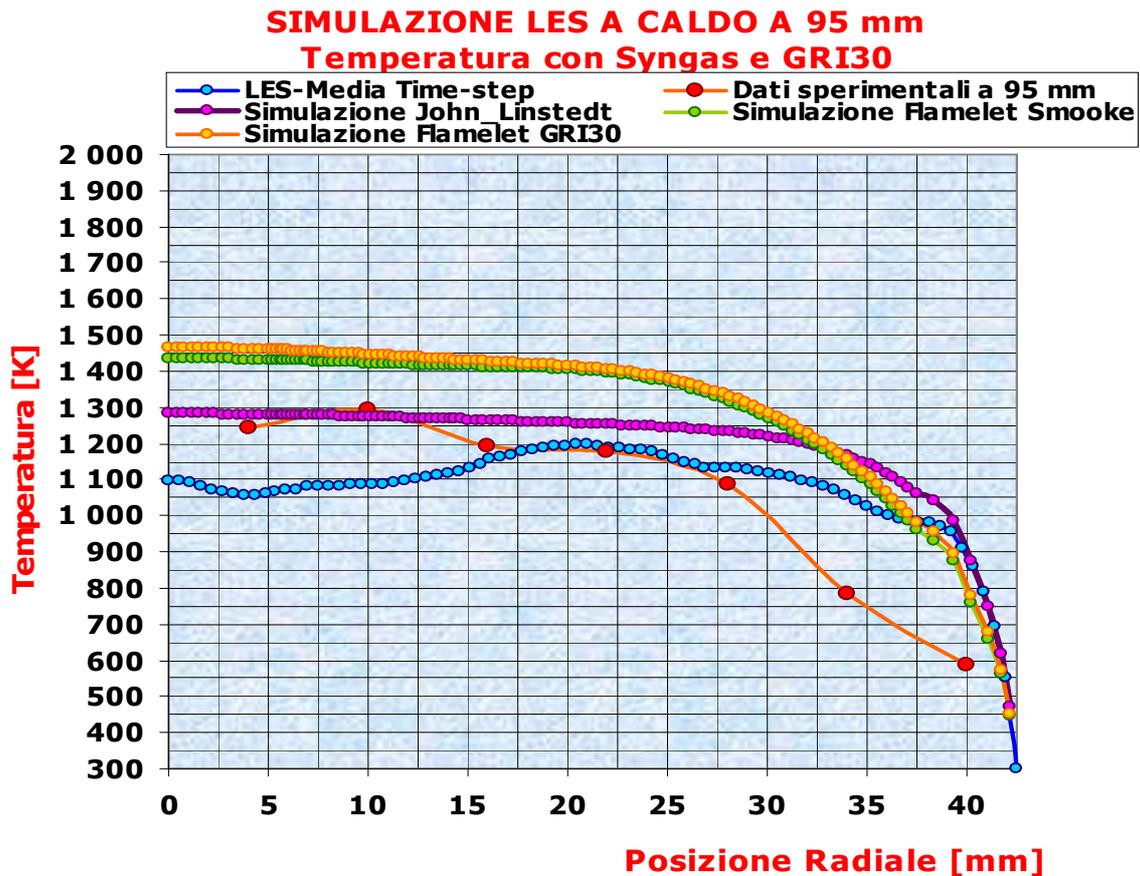


Fig 6.24

Esaminando la terza traversa tutti i profili di temperatura riportati forniscono discreti risultati in termini di distribuzione del profilo. Tutti i risultati RANS calcolati con modello *Flamelet* mostrano una sovrastima delle intensità di temperatura, problema che risulta invece assente osservando la simulazione RANS combinata con il meccanismo cinetico di John&Linstedt e dalla simulazione LES riportata in colore blu. Il profilo LES possiede mediamente un'ottima distribuzione delle intensità di temperatura, leggermente sottostimate all'asse ma perfettamente in accordo con i dati sperimentali nella zona centrale. Si nota ancora un effetto di surriscaldamento nella parte esterna della camera che sarebbe eliminabile implementando adeguati modelli di parete.

Per concludere, per ogni *time-step* di simulazione sono state prelevate immagini bidimensionali di tutte le proprietà di combustione principali. Esse sono state collezionate in un filmato che ha permesso di rendersi conto se i diversi fotogrammi fossero capaci di cogliere con sufficiente precisione le dinamiche dei vortici. Non è ovviamente possibile riportare i filmati ottenuti ma essi sono stati di aiuto nel comprendere l'evolversi delle simulazioni. Per fornire una idea dei fotogrammi analizzati in sequenza si riportano nella successiva figura 6.25 tre immagini istantanee del campo di temperatura prelevate rispettivamente a 37, 66 e 250 passi temporali dall'inizio della simulazione corrispondenti rispettivamente ad un tempo fisico di 0,019, 0,0335 e 0,1255 secondi dall'inizio della simulazione.

Le immagini rappresentano la distribuzione istantanea, quindi altamente fluttuante, stimata dalla simulazione LES. La media locale su tutti i punti della camera della temperatura ad ogni *time-step* fornisce una indicazione della temperatura media direttamente confrontabile con le simulazioni RANS e visibile nelle traverse riportate in precedenza.

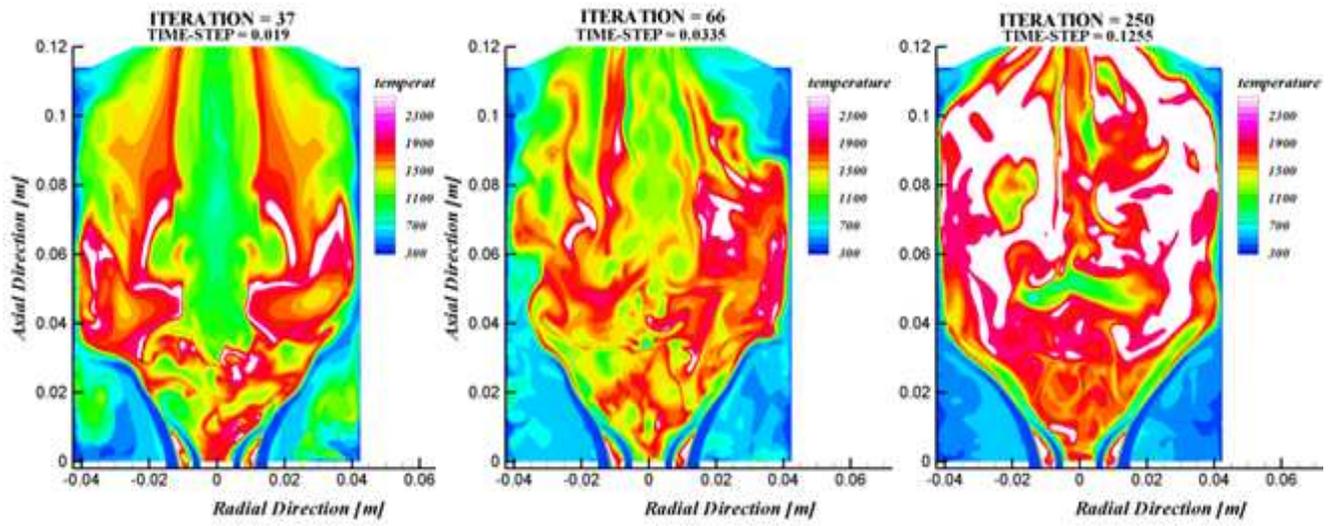


Fig 6.25

7 SIMULAZIONI ESEGUITE SULLA MTG SPERIMENTALE

7.1 Simulazioni della combustione “ricca-povera” con MTG a pieno carico. Geometria MTG1

7.1.1 – Simulazioni RANS con modelli *Flamelet* ed *EDFR*. Confronto *Singas* - *Metano*

Le simulazioni a caldo eseguite sulla microturbina hanno seguito la stessa procedura presentata descrivendo la combustione nel bruciatore di laboratorio. Esse hanno riguardato l'utilizzo del modello *Flamelet* per il quale sono stati eseguiti tutti i passi di simulazione introdotti nel paragrafo 6.1.2 e, come in precedenza l'utilizzo del modello *EDFR* [31].

La più vistosa differenza fra il lavoro relativo al bruciatore di laboratorio e quello eseguito sulla microturbina riguarda i combustibili utilizzati. In quest'ultimo caso infatti non sono previste prove sperimentali di combustione utilizzando propano che viene per questa geometria sostituito dal metano. Il metano è il combustibile ad oggi più utilizzato in queste macchine ed è perciò utile e significativo eseguire le simulazioni di confronto fra questo usuale combustibile ed il *singas*. Il *singas*, essendo un gas a basso potere calorifico sarà caratterizzato da temperature e flussi di calore di minor intensità rispetto a quelli generati nella combustione del metano. La geometria della MTG nasce per un utilizzo con il metano e le prove di simulazione, tramite l'analisi del comportamento dei gas e il monitoraggio delle emissioni hanno il principale scopo di evidenziare queste differenze e suggerire eventuali modifiche migliorative alla geometria qualora essa non fosse ottimizzata per l'alimentazione con gas alternativi derivanti da pirolisi [27] [28].

Le simulazioni hanno preso in esame, come visto, un settore tridimensionale di camera pari ad un dodicesimo del combustore anulare totale. Su di esso è stata effettuata una prima serie di simulazioni che hanno considerato la combustione del metano. Allo scopo sono stati scelti in letteratura due meccanismi di reazione molto noti, consigliati per una buona modellazione delle reazioni che intervengono nell'ossidazione del metano e del pirogas di conseguenza. I due meccanismi considerati sono il *GRI3.0* (comprendente 53 specie chimiche e 325 reazioni) [35] ed il meccanismo *SMOKE16* (comprendente 16 specie e 25 reazioni) [36]. Con questi meccanismi sono state realizzate le seguenti simulazioni:

- 1) Combustione Aria-Metano con una portata di aria proveniente dal compressore della MTG pari a 0,073 [kg/s]. Il metano è stato simulato utilizzando il meccanismo *GRI3.0* con una portata pari a 0,000553 [kg/s]. Le portate di aria e metano utilizzate rappresentano le portate elaborate dalla microturbina nelle condizioni di funzionamento a Pieno Carico. Nelle condizioni di pieno carico la macchina sviluppa la massima potenza netta all'albero pari a circa 80 kW.
- 2) Combustione di Aria-Singas sempre considerando le condizioni a Pieno Carico caratterizzata dalla stessa portata di aria del caso precedente e da una portata di combustibile pari a 0,00307 [kg/s] ed utilizzando, per il *singas* il meccanismo di reazione *SMOKE 16*.

Nel secondo anno di dottorato è stato preso in esame il solo funzionamento nominale della macchina intraprendendo simulazioni ai carichi parziali durante il terzo anno. Sono infatti a

disposizione dati sperimentali riguardanti emissioni, portate in massa e potenze erogate in condizioni di regolazione della MTG prese in considerazione solo a seguito dell'esame del funzionamento nominale di progetto della macchina.

La preparazione delle simulazioni ha previsto il settaggio delle opzioni previste dal codice FLUENT e già descritte nel paragrafo 6.1.2, per realizzare dapprima le simulazioni del campo di moto a freddo nelle due configurazioni di alimentazione con metano e con singas. In questo caso non sono a disposizione risultati sperimentali in assenza di combustione e perciò le distribuzioni a freddo di pressione e velocità sono semplicemente state analizzate fisicamente per evitare errori numerici delle simulazioni. Si poi proseguito lo studio con il settaggio del modello di combustione *Steady Laminar Flamelet* seguendo i seguenti *steps* [12]:

- 1) Creazione di 2 library flamelets, comprendenti *flamelets* multiple aventi diverso valore di *scalar dissipation*. E' stata creata una *library flamelet* per ogni diverso combustibile impiegato (Metano con GRI3.0, Metano con SMOKE 16).
- 2) Generazione delle look-up tables adiabatiche. Come spiegato nel caso del combustore di laboratorio, per ogni *library flamelet* è stato necessario calcolare le *look-up tables* adiabatiche. E' stato creato un gruppo di *look-up tables* per ognuna delle 2 tipologie di combustibili usati (2 tipi di metano) e per ogni gruppo il sistema calcola tante *look-up tables* quanti sono gli scalari da mappare.
- 3) Creazione delle look-up tables non-adiabatiche. Gli ultimi *files* di *pre-processing* necessari per poter iniziare il lancio delle simulazioni a caldo è la creazione delle *look-up tables* non adiabatiche che si differenziano dalle precedenti per il fatto di essere *look-up tables* tridimensionali costruite a strati ed aventi cioè un livello di valori per ogni diverso valore di entalpia considerato dal sistema. Nelle simulazioni eseguite sono stati considerati, parimenti al caso della camera di laboratorio, 41 diversi livelli di entalpia generando così una *look-up table* tridimensionale a 41 strati per ogni scalare coinvolto nel processo di combustione. Questa operazione, ancora una volta, è stata eseguita separatamente per i diversi combustibili utilizzati.

Dopo l'esecuzione del *pre-processing* si è passati alle simulazioni vere e proprie sulla geometria della microturbina.. Partendo dal campo di moto a freddo è stato avviato il calcolo delle due variabili principali del modello *Flamelet*, ovvero frazione di miscela Z e varianza della frazione di miscela. Con la determinazione di tali distribuzioni, FLUENT può calcolare un valore della *scalar dissipation* χ su ogni cella del dominio ed associare ad ogni cella le condizioni di combustione calcolate nella fase di *pre-processing*. Dalla lettura delle *look-up tables* il *software* potrà associare ad ogni punto del dominio e senza alcun calcolo aggiuntivo un valore di ogni scalare (temperatura, densità, pressione, frazione in massa di ogni specie).

Anche in questo caso come nella prima geometria considerata, è stata utilizzata la buona regola di simulare dapprima la combustione utilizzando le *look-up tables* adiabatiche, in modo da simulare una prima fiamma tridimensionale determinandone la superficie stechiometrica di combustione. Solo successivamente, riprendendo la simulazione da questa forma, già prossima a quella definitiva, è stata eseguita l'interrogazione delle *look-up tables* non-adiabatiche che prevedono l'attivazione, nel modello di calcolo, dell'equazione dell'energia ultimando il calcolo della combustione.

Per le simulazioni realizzate con il modello ED-FR sono state inserite nel codice le reazioni a due *steps* della combustione del metano e le tre reazioni per la simulazione della combustione chimica del singas viste nel paragrafo 6.1.3. Partendo dalla simulazione a freddo sul dominio fluido della MTG è stato lanciato il calcolo in combustione risolvendo cella per cella la chimica del sistema. I risultati ottenuti con entrambe le tipologie di simulazione (*Flamelet* ed ED-FR) sono descritte nel successivo paragrafo 7.1.2.

7.1.2 – Analisi dei risultati ed emissioni inquinanti

I primi risultati ottenuti con le simulazioni di combustione hanno riguardano la sola alimentazione a metano della MTG. Il motivo di questo modo di procedere è stato imposto dall'assenza, durante la prima metà del dottorato, di settaggi sperimentali con cui eseguire le prove di combustione del singas sul prototipo di MTG e, di conseguenza, dalla mancanza di risultati sperimentali di temperatura ed emissioni inquinanti relativamente all'utilizzo del combustibile da pirolisi. Questi dati sono arrivati solo in un secondo momento e in attesa le simulazioni condotte sulla MTG hanno riguardato il confronto con metano fra i diversi modelli di combustione. E' stato testato il modello *Flamelet* a confronto con il modello di combustione ED-FR (*Finite Rate-Eddy Dissipation*). Sono di seguito rappresentati i risultati ottenuti analizzando un settore tridimensionale della camera di combustione anulare.

A causa della forma geometrica abbastanza complessa del combustore la visione del campo di velocità e delle successive grandezze viene proposta sui due piani principali della camera di combustione, ovvero il piano X-Y longitudinale alla macchina e il piano Y-Z passante per l'asse degli ugelli del combustibile.

Inoltre va ricordato che questa prima serie di risultati riguardano la prima geometria discretizzata, chiamata MTG1, che essendo la prima realizzazione appare sicuramente più grezza rispetto a ciò che sarà esaminato nei successivi paragrafi. E' proprio il lavoro eseguito su questa geometria che ha guidato le modifiche effettuate sul dominio fluido MTG2 dando la possibilità di evitare sulla geometria più avanzata le carenze colte sulla griglia precedente.

Si prenderanno di seguito in esame i campi di velocità, temperatura, emissioni di CO e di CO₂.

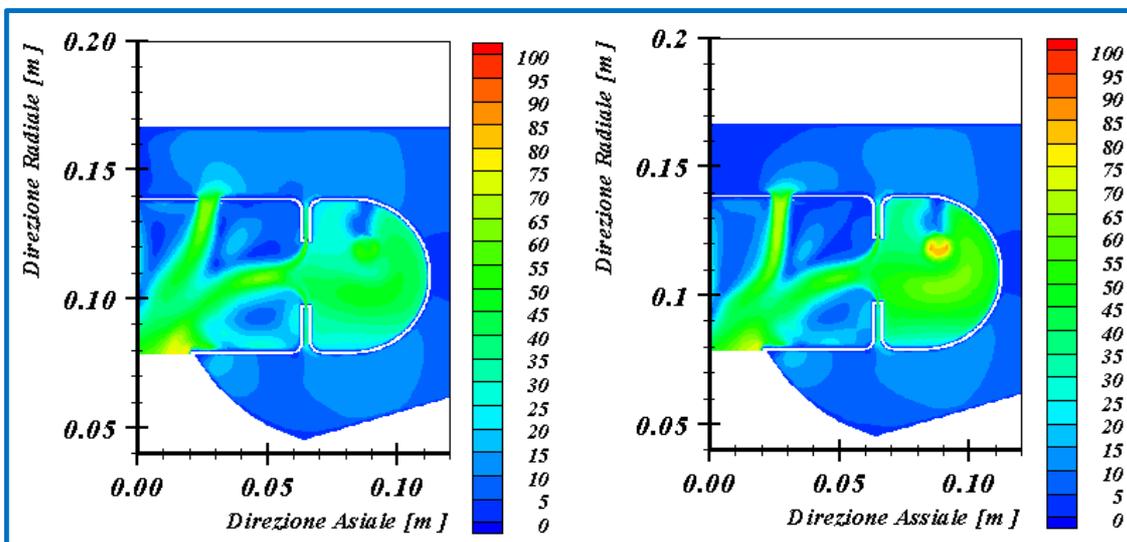


Fig 7.1

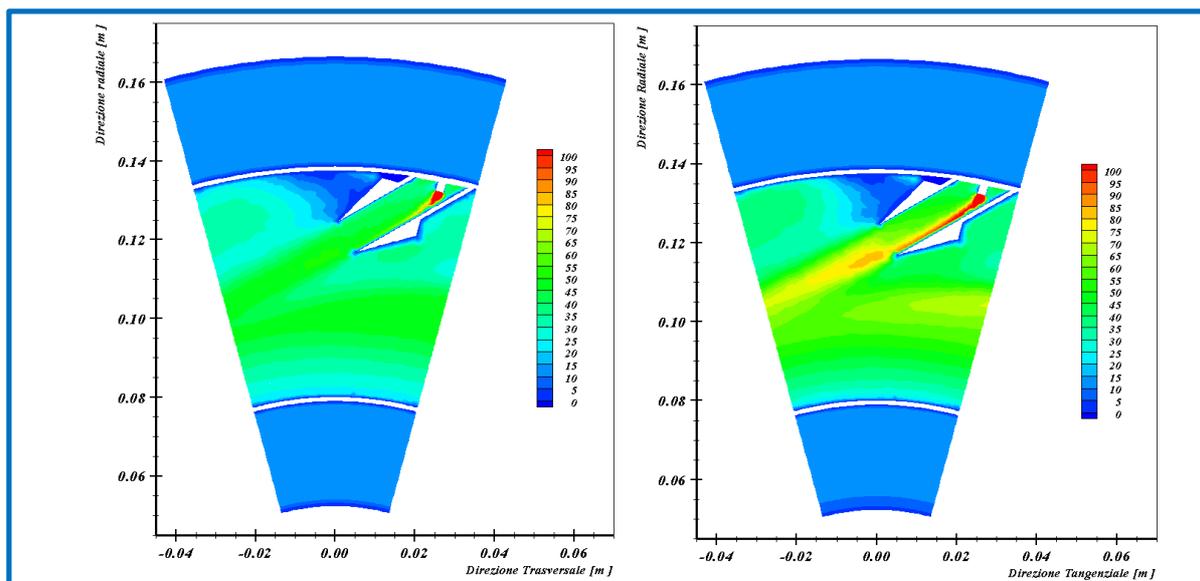


Fig 7.2

I profili di velocità riportati sulla destra rappresentano i risultati ottenuti con il modello *Flamelet*. Si riscontrano velocità interne all'ugello più alte rispetto a quanto si può vedere nel caso EDFR. All'uscita dell'ugello (piano Y-Z) si nota infatti un aumento della velocità di circa $20 \div 30$ [m/s] che è sicuramente imputabile alla diminuzione di densità prevista dal modello *Flamelets*. Esso infatti mostra (si veda la figura 7.3) temperature più elevate e reazioni di combustione più rapide che iniziano subito all'interno dello ugello per uscire da esso già parzialmente ultimate e ad alta temperatura. La minor densità comporta quindi più elevate velocità di uscita che nel modello EDFR non si notano.

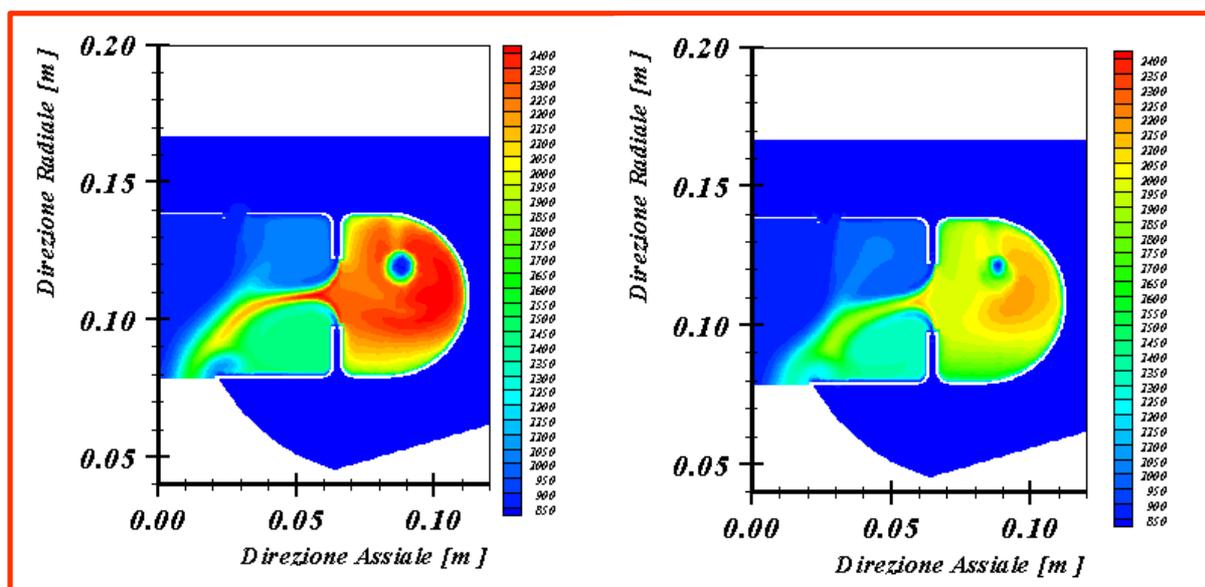


Fig 7.3

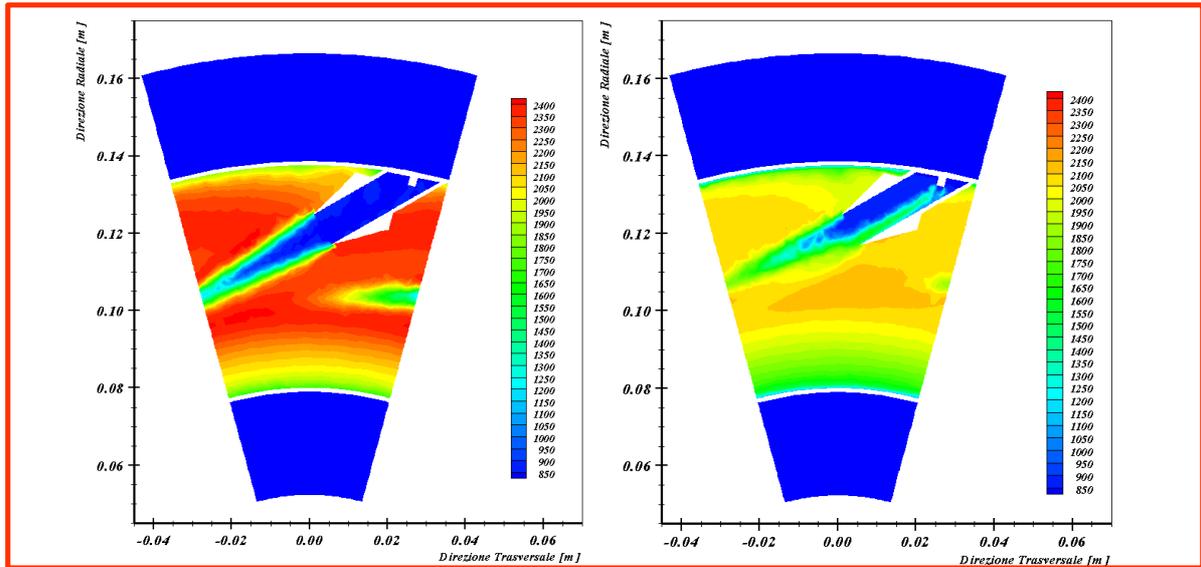


Fig 7.4

Per quanto riguarda i profili di temperatura nelle due simulazioni (EDFR sulla sinistra e *Flamelet* sulla destra) si nota una temperatura nettamente maggiore nel primo caso EDFR all'interno della camera primaria che tende a mantenersi leggermente maggiore anche nel passaggio alla camera secondaria. La differenza di temperatura che si nota fra i due modelli è dell'ordine dei 400 °C di differenza. A differenza di quanto avveniva per la camera di laboratorio il modello *Flamelet* porta ora a temperature più basse e perciò un risultato parzialmente contraddittorio. Questo può anche essere imputato al tempo di iterazione del modello EDFR avendo notato che all'aumentare delle iterazioni il modello tende a prevedere un raffreddamento.

Si nota inoltre, guardando la simulazione sul piano Y-Z, una maggior precisione del modello *Flamelet* a prevedere l'inizio della reazione che ha luogo subito dopo l'introduzione del combustibile all'interno dell'ugello. Al contrario, il modello EDFR prevede lo sviluppo delle reazioni di combustione all'uscita dall'ugello all'interno della camera primaria; un risultato, questo, che appare meno preciso rispetto a quello che ci si aspetterebbe nel caso reale dove aria e combustibile si incontrano e iniziano a perfezionare il loro miscelamento all'interno del *mixing tube* di iniezione. Relativamente a queste simulazioni il modello *Flamelet* sembrerebbe rappresentare più fedelmente la fisica del miscelamento e della combustione ricca-povera. Occorre, per assicurare questo risultato osservare la predizione di altre variabili fra cui le successive emissioni inquinanti.

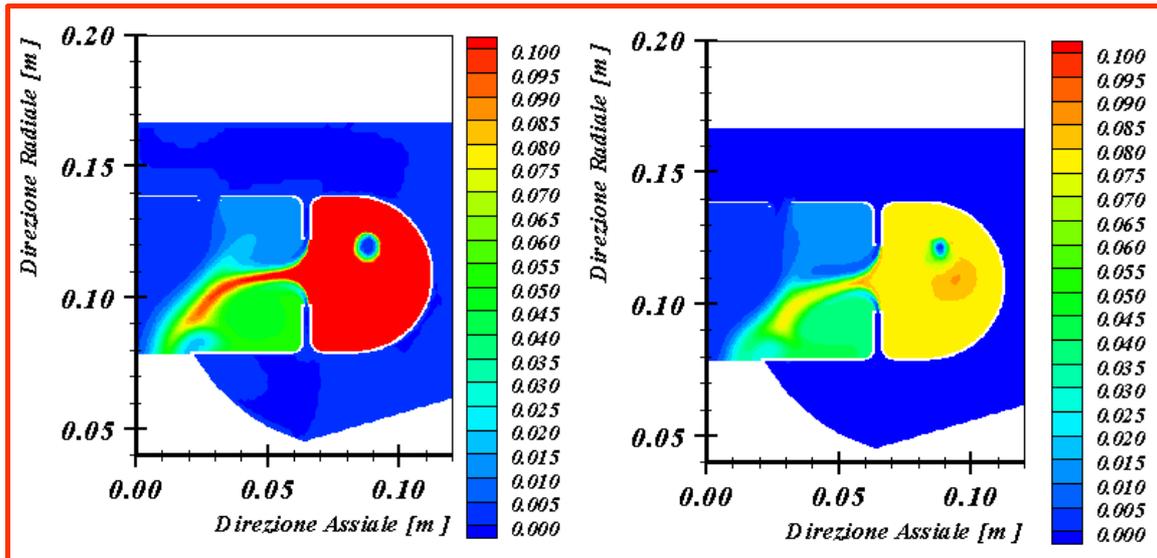


Fig 7.5

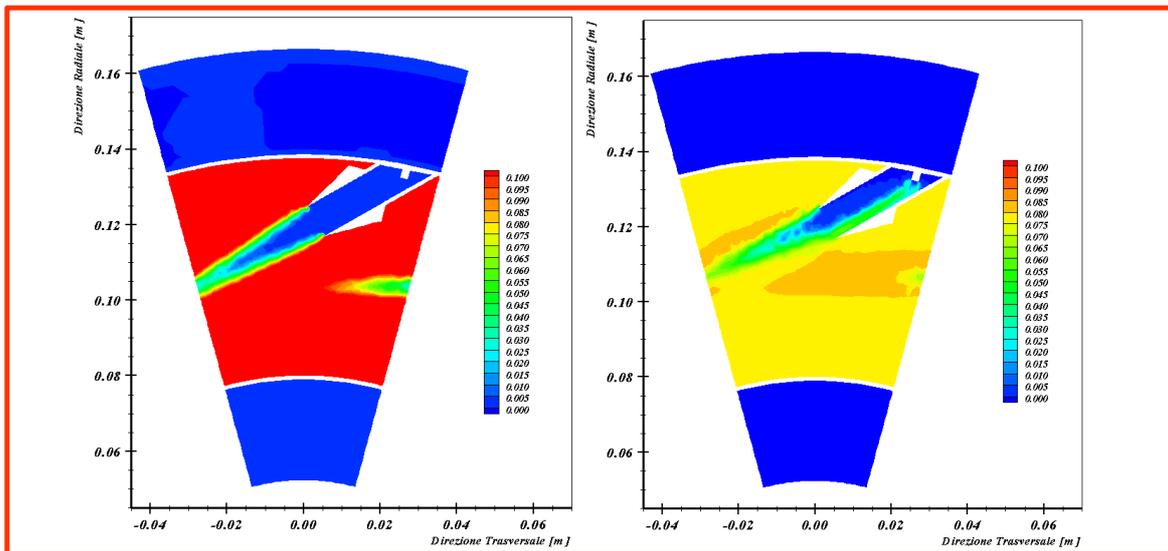


Fig 7.6

Per quanto riguarda le emissioni di CO₂ prodotte nella camera di combustione della MTG abbiamo una produzione in massa pari al 10% in camera primaria stimato dal modello EDJR contro l'8% in massa stimato dal modello *Flamelet*. La differenza non è molto grande tenendo presente che questa frazione in massa si riduce in camera secondaria su entrambe le simulazioni. Ad ogni modo la quantità di CO₂ che si trova ad entrare in turbina nel caso EDJR è più elevata e questo potrebbe essere sintomo, a parità di condizioni iniziali, di una combustione migliore. Occorre però considerare che alle più alte temperature può essere maggiore l'entità della CO₂ persa per dissociazione e trasformata in CO e questo porterebbe ad una peggiore combustione. In ultimo è presa in considerazione l'emissione di monossido di carbonio:

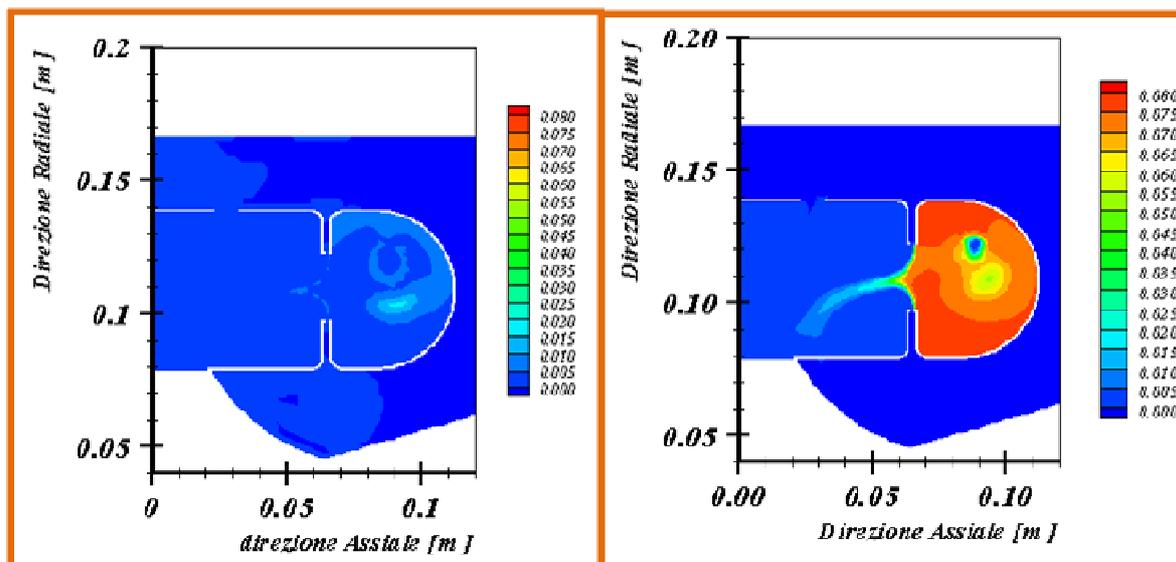


Fig 7.7

Esaminando l'emissione di monossido di carbonio nei due casi si nota che, la presenza di CO è maggiore nel caso simulato con il modello *steady flamelet* e questo risultato è in buon accordo con quello visto per l'emissione della CO₂. Laddove la CO₂ è minore è più alto il contenuto di CO. Ciò significa che la combustione prevista dal modello *flamelet* in camera primaria è meno efficace di quella simulata con il modello EDFR. Il CO prodotto in camera primaria diminuisce fortemente nel passaggio in camera secondaria provocando l'ulteriore ossidazione a CO₂ e la diminuzione del CO residuo. Giudicando il tipico funzionamento delle camere di combustione *RQL* sembrerebbe più corretta la previsione di una maggiore quantità di CO in camera primaria, dove è più alto il rapporto di equivalenza ed è previsto che parte del combustibile non possa trovare la necessaria aria per bruciare. Il completamento della combustione deve infatti avvenire in regime povero dopo la sezione di passaggio in camera secondaria. Questo è ciò che succede in entrambi i casi anche se è più evidente questa tipologia di funzionamento nel risultato proposto con l'utilizzo del modello *flamelet*.

7.2 Simulazioni della combustione “ricca-povera” con MTG a pieno carico. Geometria MTG2

7.2.1 – Confronto fra le impostazioni delle geometrie MTG1 ed MTG2

Con la realizzazione della più recente geometria MTG2 è stata in parte ripensata la logica di attribuzione delle *boundary conditions* per la realizzazione delle diverse simulazioni.

La logica di attribuzione delle condizioni al contorno utilizzate nella geometria MTG1 prevedeva l'imposizione delle portate in massa di aria uscente dal compressore e della parte di questa portata capace di entrare in camera primaria. Conoscendo quindi la portata in ingresso alla prima camera del *liner*, la portata di combustibile da iniettare è quella necessaria per l'ottenimento di un rapporto di equivalenza pari a $\phi = 2$. La restante differenza rispetto alla portata totale veniva suddivisa fra gli ingressi secondari e di diluizione secondo un calcolo fluidodinamico lasciato al codice CFD. Le

motivazioni di questo principio di settaggio erano dovuti al dato sperimentale secondo cui il *liner* era realizzato per generare questo rapporto di equivalenza medio in camera primaria.

La logica è stata modificata con l'avvento della griglia MTG2. Si è infatti pensato che l'imposizione dell'aria in ingresso in camera primaria fosse una forzatura in quanto l'area di passaggio per l'ingresso ai *mixing tubes* è imposta dalla geometria. E' sembrato invece più aderente alla realtà il fatto di lasciare che il codice stabilisca l'entità dell'aria effettivamente entrante nel *liner*, in base alla simulazione della fluidodinamica dell'aria uscente dal compressore, alla sua temperatura e alla posizione della luce di ingresso rispetto alle componenti di velocità del flusso stesso. Il ragionamento è stato inoltre supportato dal fatto che non era realistico imporre un rapporto di equivalenza pari a 2 sia per l'alimentazione a metano che nel caso del singas. Si è lasciato quindi il calcolo dell'aria entrante al *software* [12] e, imposte le portate di combustibile corrispondenti a quelle delle prove sperimentali si è lasciato variabile il valore del rapporto di equivalenza medio in entrambe le camere, ricca e povera, del bruciatore anulare.

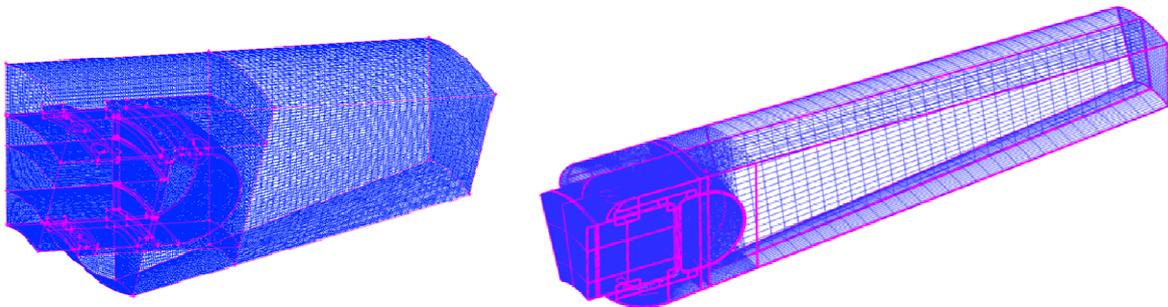


Fig 7.8

Si riporta uno schema semplificato delle modifiche effettuate alle *boundary conditions* passando dalla geometria MTG1 alla geometria MTG2

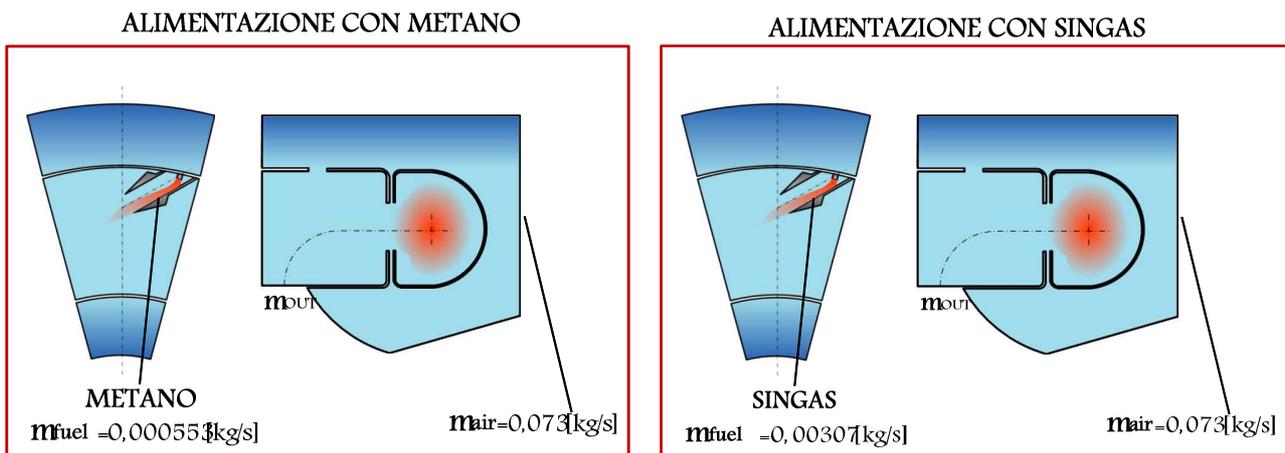


Fig 7.9

Le condizioni al contorno sono quindi variate, rispettivamente nel caso di alimentazione a metano e a singas in base ai dati riportati nelle seguenti tabelle Tab 7.1 e Tab 7.2 [12]:

SIMULAZIONE METANO - ARIA			
CARATTERISTICHE	ARIA DAL COMPRESSORE	COMBUSTIBILE	U.M.
Portata	0,073	0,000553	[kg/s]
Temperatura	812	290	[K]
Pressione	3,834	5,8	[bar]
Direzione del flusso	Normale alla sezione di uscita compressore	Normale alla sezione di iniezione	[/]
Frazione in massa della miscela	$Y_{O_2} = 0,233$	$Y_{CH_4} = 0,233$	[/]
	$Y_{N_2} = 0,767$		[/]

Tab 7.1

SIMULAZIONE SYNGAS - ARIA			
CARATTERISTICHE	ARIA DAL COMPRESSORE	COMBUSTIBILE	U.M.
Portata	0,073	0,00307	[kg/s]
Temperatura	812	290	[K]
Pressione	3,834	5,8	[bar]
Direzione del flusso	Normale alla sezione di uscita compressore	Normale alla sezione di iniezione	[/]
Frazione in massa della miscela	$Y_{O_2} = 0,233$ $Y_{N_2} = 0,767$	$Y_{CH_4} = 0,113$	[/]
		$Y_{CO_2} = 0,562$	[/]
		$Y_{CO} = 0,273$	[/]
		$Y_{H_2} = 0,0047$	[/]

Tab 7.2

Altre differenze importanti stanno nel fatto che è stato simulato tutto il condotto anulare presente fra la corona circolare di mandata del compressore e l'ingresso nel *liner* mentre la geometria MTG1 prevedeva di trascurare tutta la prima parte di esso. Questo permetteva un numero minore di celle di calcolo e di conseguenza un calcolo più snello nella prima geometria. Il numero di celle, nel passaggio dalla geometria 2009 alla geometria 2010 è quindi cresciuto portandosi dalle 620 000 celle a circa 1 000 000 nella geometria MTG2. L'incremento è imputabile anche ad una maggior definizione delle pareti del *liner*, al maggior numero di celle dedicate allo stretto canale di accesso fra le due camere primaria e secondaria e ad un aumento di celle nel mixing tube per far sì di catturare ancora meglio la propagazione delle prime fasi di combustione. Un maggior numero di celle ha dato la possibilità, come detto nel paragrafo 5, di inserire all'interno della geometria tridimensionale un maggior numero di piani di misura utilizzati per il controllo più stretto dei parametri fisici e di combustione.

7.2.3 – Analisi dei risultati a pieno carico: Geometria MTG2

A dimostrazione dei risultati ottenuti si riporta la distribuzione di temperatura ottenuta sul piano longitudinale della macchina [28]:

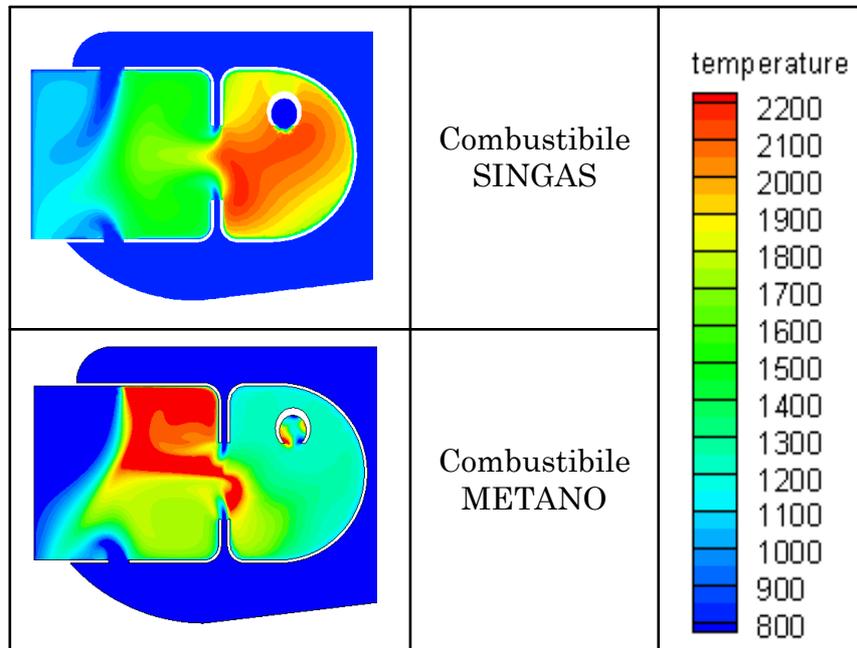


Fig 7.10

Entrambi i risultati di figura 7.10 e 7.11 sono ottenuti con simulazioni di combustione utilizzando il meccanismo EDFF a confronto con le stesse immagini ottenute con il modello *flamelet* riportate nelle successive figure 7.11 e 7.12. Si può anzitutto notare che il singas raggiunge più alte temperature in camera primaria al contrario del metano che sviluppa maggior calore in camera secondaria. Questo è un risultato atteso e coerente in quanto la combustione stechiometrica del singas richiede molta meno aria di quella necessaria per l'ossidazione completa del metano. Siccome in camera primaria può accedere una scarsa quantità di aria primaria solo il singas si avvicinerà maggiormente alle condizioni stechiometriche di combustione. Nel caso del metano invece è solo con l'introduzione dell'aria secondaria che si completa la reazione di ossidazione per poi miscelare il tutto con l'aria di diluizione per abbassare la temperatura. Questa diluizione permette in entrambe le simulazioni di scendere a valori ammissibili per l'ingresso turbina. Quanto detto è confermato esaminando la distribuzione di temperatura in un piano passante per l'asse dell'iniettore e riportato in Figura 7.10. Questo piano mostra lo *stress* termico in camera primaria; si nota, riprendendo la descrizione precedente, una temperatura del singas uniformemente più elevata, nell'immagine di figura 7.10; minore invece quella del metano al quale non è messa a disposizione una sufficiente quantità di aria.

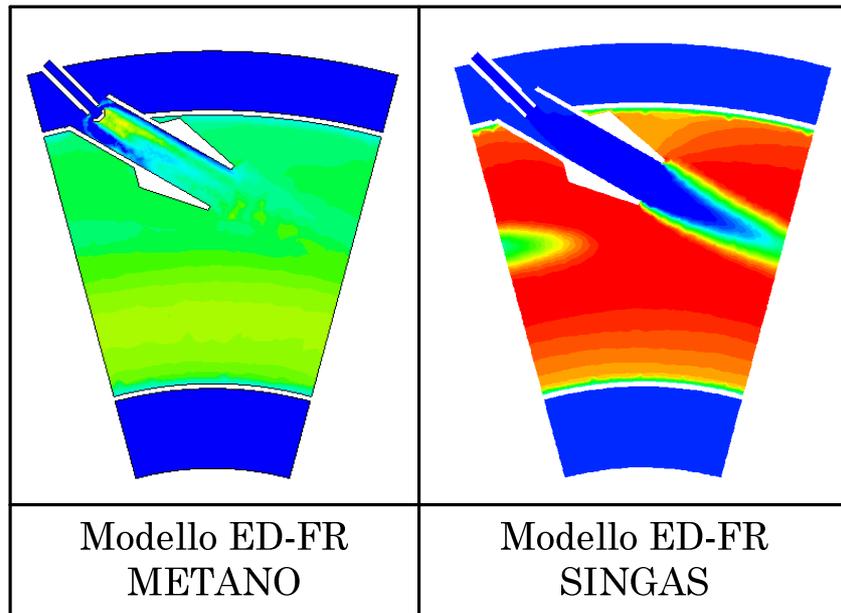


Fig 7.10

L'immagine sopra mostra inoltre una maggior reattività del metano all'interno dell'ugello che non si ha nel caso del singas. Questo è imputabile alla diversa geometria degli iniettori. L'iniettore del metano, realizzato nella geometria MTG2 a tre fori, frena il combustibile e ne favorisce maggiormente il miscelamento. Il combustibile inizia quindi anticipatamente la combustione. Il getto dell'iniettore del singas, aperto direttamente verso il flusso d'aria, genera una iniezione ad alta velocità nell'ugello che porta la combustione a svilupparsi più a valle, in camera primaria dove si ha il rallentamento della miscela. A questo si aggiunge l'effetto numerico della combustione semplificata dal meccanismo a 4 step implementato con il modello ED-FR con cui la combustione risulta più impulsiva rispetto a più elaborati modelli (come il *flamelet*) che apprezzano distribuzioni di specie e temperatura sul dominio di calcolo di migliore qualità.

Si riportano le distribuzioni di temperatura ottenute in questo caso [28]:

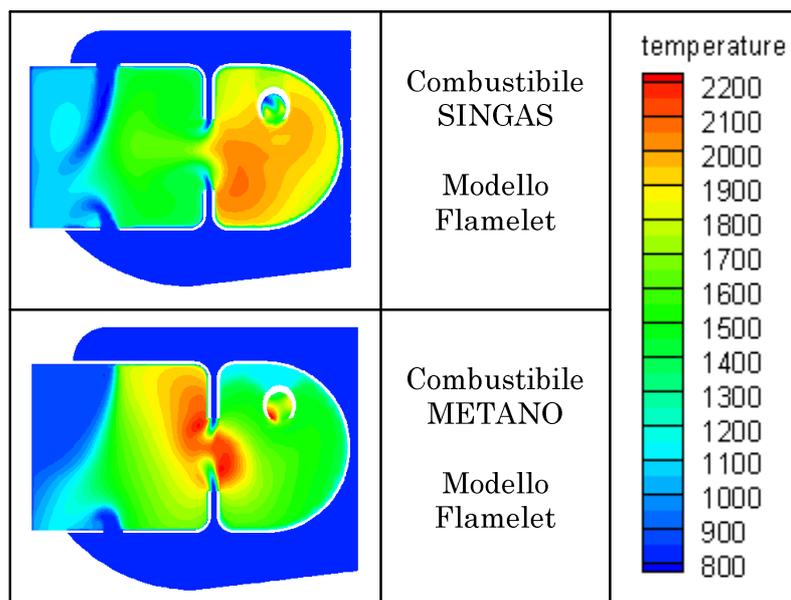


Fig 7.11

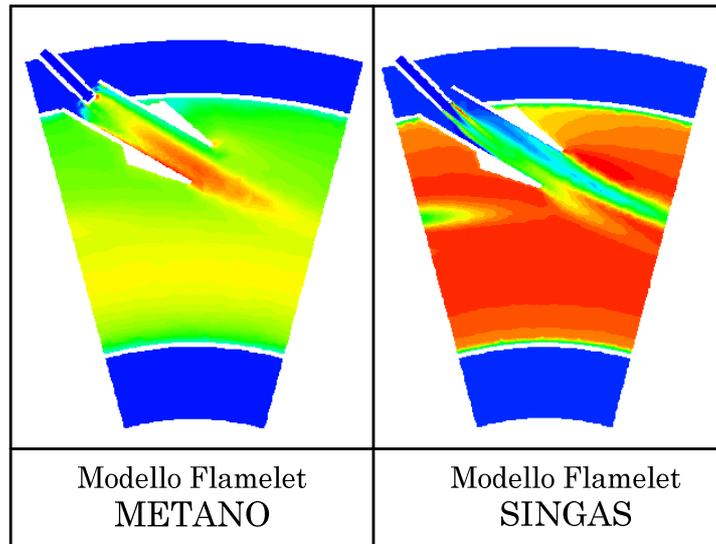


Fig 7.12

Anche nel caso del modello *flamelet* vengono confermate le tesi viste nelle precedenti simulazioni. In più si può notare una maggior precisione nella descrizione della combustione all'interno dell'iniettore per entrambi i combustibili. La combustione nel caso *flamelet* è più finemente apprezzata e modellata grazie alla migliore qualità del modello nonostante si noti sempre uno stadio più avanzato di combustione nell'attraversamento del *mixing tube* del metano dovuto all'iniettore a tre fori.

A seguito delle simulazioni a pieno carico sono state analizzate le simulazioni ai carichi parziali. La MTG, capace di sviluppare circa 80 kWe nominali a pieno carico, può essere esercitata parzializzandone le potenzialità. In queste condizioni può portarsi a sviluppare un minimo di circa 10 kWe. Esse sono prese in esame nel paragrafo successivo.

7.3 Parzializzazione dei carichi della MTG. Simulazioni della combustione “ricca-povera”

7.3.1 – Impostazioni delle simulazioni ai carichi parziali

Per esaminare le caratteristiche di funzionamento della MTG fuori dalle condizioni di *design* sono state prese in esame sette condizioni di regolazione. Per ognuna è stato simulato il processo di combustione al fine di ricostruire per via numerica le principali emissioni inquinanti intese come media sulla sezione di uscita del bruciatore (ingresso turbina).

Anzitutto sono state determinate le condizioni al contorno da utilizzare sulla geometria MTG2. Come nel caso di pieno carico sono state fissate, per ogni condizione di parzializzazione le portate di aria uscente dal compressore e le portate di combustibile derivanti dai dati sperimentali lasciando quindi libero il valore del rapporto di equivalenza nelle camere ricca e povera.

Al fine di ottenere simulazioni più aderenti al fenomeno reale è stato necessario affiancare alle simulazioni 3D anche alcune simulazioni 2D, una per ogni condizione di parzializzazione, al fine di determinare la temperatura interna di parete delle due camere del liner, utilizzata come *boundary conditions* di ingresso.

La procedura seguita per la determinazione delle temperature e delle condizioni al contorno è stata la seguente:

- 1) Si esamina ora uno dei sette casi di parzializzazione estendendo i ragionamenti seguiti anche alle altre condizioni di carico. Dalle prove sperimentali eseguite sulla MTG nel caso di regolazione a metà della potenza nominale (40 kW nominali elettrici prodotti) si conosce la portata di aria \dot{m}_a proveniente dal compressore e la portata in massa di combustibile \dot{m}_c utilizzate nelle prove sperimentali per ottenere la potenza richiesta di 4 kW_e. Nella simulazione, non potendo controllare la potenza elettrica in uscita sarà utilizzata la \dot{m}_c imposta.

Dalla \dot{m}_a nota in arrivo dal compressore viene invece calcolata la portata di aria che dovrebbe entrare nel compressore per realizzare le ideali condizioni di rapporto equivalenza pari a 2 in camera primaria. Questa informazione non sarà utilizzata come condizione al contorno delle simulazioni tridimensionali ai carichi parziali ma solo nelle simulazioni 2D per la determinazione di una temperatura di parete della camera primaria e secondaria.

Svolgendo i semplici calcoli per il solo caso 40 kW_e si ha:

Aria in arrivo da 1/12 della sezione di uscita del compressore:

$$\dot{m}_a = 0,085 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Portata di combustibile

$$\dot{m}_c = 0,000491 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Calcolo della portata entrante in camera primaria nel caso si realizzasse un rapporto di equivalenza pari a 2:

$$\phi = \frac{\lambda_{st}}{\lambda} = 2 \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{\lambda_{st}}{\phi} \quad \rightarrow \quad \lambda = \frac{\dot{m}_{a_iniett}}{\dot{m}_c} \quad \rightarrow \quad \frac{\dot{m}_{a_iniett}}{\dot{m}_c} = \frac{\lambda_{st}}{\phi}$$

$$\dot{m}_{a_iniett} = \frac{\dot{m}_c \cdot \lambda_{st}}{\phi} = \frac{0,000491 \cdot 17,4}{2} = 0,00427 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Allo stesso modo, ripetendo i calcoli per le successive condizioni di parzializzazione si ottengono i seguenti risultati:

CARICO %	10	20	30	40	50	60	70	80	U.d.M
portata aria all'iniettore	0,004272	0,003906	0,004089	0,004272	0,004507	0,004837	0,004942	0,004811	kg/s
portata combustibile	0,000434	0,000449	0,000470	0,000491	0,000518	0,000556	0,000568	0,000553	kg/s

Tab 7.3

2) E' stata poi realizzata la griglia di calcolo bidimensionale per il calcolo delle temperature di parete. Allo scopo è stata calcolata dapprima l'area equivalente del *mixing tube* per la realizzazione di una sua schematizzazione sulle geometrie 2D. Il *mixing tube*, infatti non può essere visto in una rappresentazione 2D della camera di combustione e viene sostituito da una schematica ma efficace sezione di ingresso equivalente di aria primaria e combustibile già parzialmente premiscelati allo stesso modo di come avverrà nel caso 3D. Per le simulazioni 2D è stata realizzata una mesh apposita composta da 43.000 celle, capace di sviluppare il calcolo delle temperature di parete in tempi molto rapidi. Si riporta il calcolo dell'area equivalente del *mixing tube* al successivo punto 3

3) Si riporta il calcolo dell'area equivalente del *mixing tube*.

Nel combustore della MTG sono presenti 12 ugelli nei quali inizia il premiscelamento di combustibile e comburente.

L'area corrispondente alla sezione di uscita dei 12 ugelli della MTG (prendendo a riferimento il caso del metano) vale:

$$D_{ug} = 9[mm]$$

$$A_{ug} = \frac{\pi \cdot D_{ug}^2}{4} = \frac{\pi \cdot 9^2}{4} = 63,617[mm^2]$$

$$A_{12_ug} = A_{ug} \cdot 12 = 63,617 \cdot 12 = 763,407[mm^2] = 0,000763[m^2]$$

L'area equivalente da realizzare nella mesh 2D verrà generata con un'area pari a questo valore.

La sezione di uscita di tutti gli ugelli ha il centro *A* passante per una circonferenza comune del *liner*. Di essa occorre determinare il raggio per far sì di costruire l'area equivalente alla stessa distanza.

La misura del raggio *r* di tale circonferenza è stata eseguita sul *software mesh* GAMBIT leggendo le coordinate del punto *A* di uno degli ugelli:

$$A(88 ; 120,810904 ; 3,089152)$$

La coordinata y_A del punto *A* scritta sopra rappresenta il raggio r_c della circonferenza tangente al punto centrale della superficie di ogni ugello.

Essendo quindi:

$$r_c = 120,8109[mm]$$

Si ricava lo spessore s_c della circonferenza di lunghezza L_c calcolabili conoscendo il raggio e l'area dell'anello da cui usciranno aria e combustibile premiscelati

$$L_c = 2 \cdot \pi \cdot r_c = 2\pi \cdot 120,8109 = 759[mm]$$

L'area equivalente A_e della circonferenza deve risultare uguale all'area di uscita degli ugelli:

$$A_{eq} = A_{12_ug} \quad \rightarrow \quad A_{12_ug} = L_c \cdot s_c \quad \rightarrow \quad s_c = \frac{A_{12_ug}}{L_c} = \frac{763,407}{759} = 1,005806 [mm]$$

Per realizzare l'area equivalente nella geometria 2D della MTG è stata realizzata un'area di uscita di lunghezza pari ad s_c che si suppone assialsimmetrica, posta in camera primaria della MTG a distanza r_c dall'asse del bruciatore

- 4) Per il settaggio delle condizioni al contorno sulle geometrie bidimensionali rimane da determinare le frazioni in massa di aria e combustibile (e dei loro componenti) presenti all'uscita dell'area equivalente. Essi infatti iniziano il miscelamento internamente al mixing tube uscendo premiscelati. Questo calcolo è stato eseguito nel seguente modo:

La massa entrante dalla superficie equivalente è composta da aria e combustibile. Si prende in esame, come esempio, il caso di parzializzazione al 10% del carico nominale in cui si ha:

Portata entrante in camera primaria nel caso si realizzasse un rapporto di equivalenza pari a 2:

$$\dot{m}_{a_iniet} = 0,004272 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Portata di combustibile

$$\dot{m}_c = 0,000434 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Entrambe le portate entrano premiscelate all'ingresso con una portata totale pari a:

$$\dot{m}_{c+a_iniet} = 0,000434 + 0,004272 = 0,004706 \left[\frac{kg}{s} \right]$$

Di questa portata entrante la frazione in massa di CH_4 è data da:

$$x_{CH_4} = \frac{\dot{m}_c(P = 10\%)}{\dot{m}_{c+a_iniet}} = \frac{0,000434}{0,004706} = 0,0922$$

$$x_{aria} = \frac{\dot{m}_{a_iniet}(P = 10\%)}{\dot{m}_{c+a_iniet}} = \frac{0,004272}{0,004706} = 0,9078$$

Della frazione in massa di aria calcolata circa il 23% in massa è ossigeno mentre il restante 76,7% in massa può essere considerato azoto:

$$x_{O_2}(\text{nell'aria}) = x_{aria} \cdot 0,233 = 0,9078 \cdot 0,233 = 0,2115$$

$$x_{N_2}(\text{nell'aria}) = x_{aria} \cdot 0,767 = 0,9078 \cdot 0,767 = 0,6963$$

Da quanto detto risultano le frazioni in massa dei reagenti in uscita dall'ugello (è stato presentato il solo caso del metano per brevità)

$$x_{CH_4} = 0,0922$$

$$x_{O_2} = 0,2115$$

$$x_{N_2} = 0,6963$$

5) Le simulazioni 2D sono state completate con le portate in massa, le condizioni iniziali di temperatura e pressione dei reagenti all'ingresso e di tutti i settaggi necessari a realizzare le simulazioni RANS di combustione per ogni condizione di parzializzazione. I risultati ottenuti per ciascuna simulazione sono stati il valore medio della temperatura interna di parete della camera primaria e della camera secondaria.

6) Sono infine state settate le simulazioni tridimensionali imponendo le temperature di parete numericamente calcolate come condizioni al contorno. Sia nel caso dell'alimentazione a metano che nel caso di alimentazione con singas sono state eseguite le simulazioni di combustione ai carichi parziali allo scopo di indagare la distribuzione dei campi di temperatura e delle emissioni inquinanti ottenute nel funzionamento in parzializzato.

Si riportano a seguito i grafici e le tabelle contenenti le *boundary conditions* utilizzate ed imposte alle simulazioni in termini di portate in massa di aria e combustibile al variare del carico [27]:

POTENZA [kW _{EI}]								
	10	20	30	40	50	60	70	80
\dot{m}_a [kg/s]	0.086	0.083	0.087	0.085	0.085	0.089	0.083	0.073
T_a [K]	592	616	654	676	703	737	766	812
P_a [bar]	3.682	3.694	3.712	3.724	3.745	3.784	3.822	3.834
\dot{m}_f [kg/s]	4.34E-4	4.49E-4	4.70E-4	4.91E-4	5.18E-4	5.56E-4	5.68E-4	5.53E-4
T_f	290							
P_f	5.8							

Tab 7.4

Elliott TA80 R portata aria

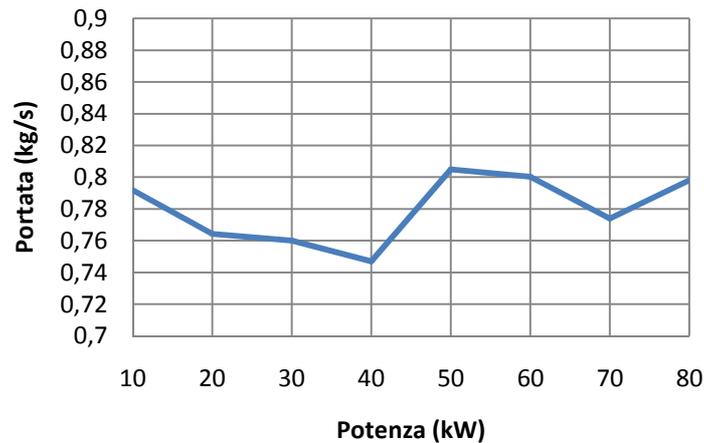


Fig 7.13

7.3.2 – Risultati ai carichi parziali

Per ciascuna simulazione ai carichi parziali sono state realizzate immagini per mettere in evidenza le differenze fra le distribuzioni di temperatura e il progresso di reazione al variare del carico. Da questo punto di vista è interessante notare che, analizzando queste distribuzioni sui vari piani della camera, non vengono riscontrate particolari diversità. Si notano variazioni delle distribuzioni che però non condizionano pesantemente l'aspetto termico interno del combustore, penalizzando quindi marginalmente il rendimento termodinamico al diminuire del carico. Il calo delle prestazioni è dovuto soprattutto ad una minore introduzione di combustibile accompagnata da una minore quantità di aria in uscita dal compressore. La riduzione di aria, impraticabile nei grandi turbogas a meno dell'utilizzo di compressori a geometria variabile, è in questo caso realizzabile con il rallentamento della velocità di rotazione dell'albero del compressore. Nelle MTG infatti la velocità di rotazione può essere agevolmente modificata non essendoci una diretta connessione con un alternatore a velocità di rotazione imposta. Si cerca quindi di mantenere un vantaggioso rapporto aria-combustibile pur riducendo le quantità di reagenti introdotte. Per questa piccola variabilità della qualità della miscela non è interessante proporre le immagini dei profili di temperatura in quanto esse risultano comunque molto simili all'aumentare della regolazione. Il calo delle portate di miscela e la seppur contenuta oscillazione delle temperature interne puntuali condiziona invece l'entità delle emissioni inquinanti. Allontanandosi dalle condizioni di *design* si può notare un generale innalzamento delle emissioni come è visibile in tabella 7.5 leggendo da destra verso sinistra [28]:

	POTENZA [kW _{EI}]							
	10	20	30	40	50	60	70	80
O ₂ (%vol)	19.3	19.2	19.1	19	18.9	18.8	18.6	18.4
CO ₂ (%vol)	0.92	0.97	1.01	1.07	1.14	1.21	1.28	1.37
CO (ppm)	318	254	186	143	101	71	53	42
NO _x (ppm)	7	8	9	10	13	15	18	21

Tab 7.5

Il controllo più delicato va quindi eseguito sull'entità delle emissioni per le quali si riportano due grafici. In essi sono riassunte le caratteristiche emissioni principali della MTG in esame per ogni condizione di regolazione simulata, il primo grafico fa riferimento alle emissioni di ossidi di azoto (NO_x) proponendo l'entità in parti per milione dell'emissione misurata sul flusso uscente di fumi secchi. Esse sono state riferite, per permettere confronti, al 15% di ossigeno contenuto nei fumi secchi. Nel secondo grafico si hanno, in funzione del grado di regolazione della macchina, i valori dell'emissione di CO [28].

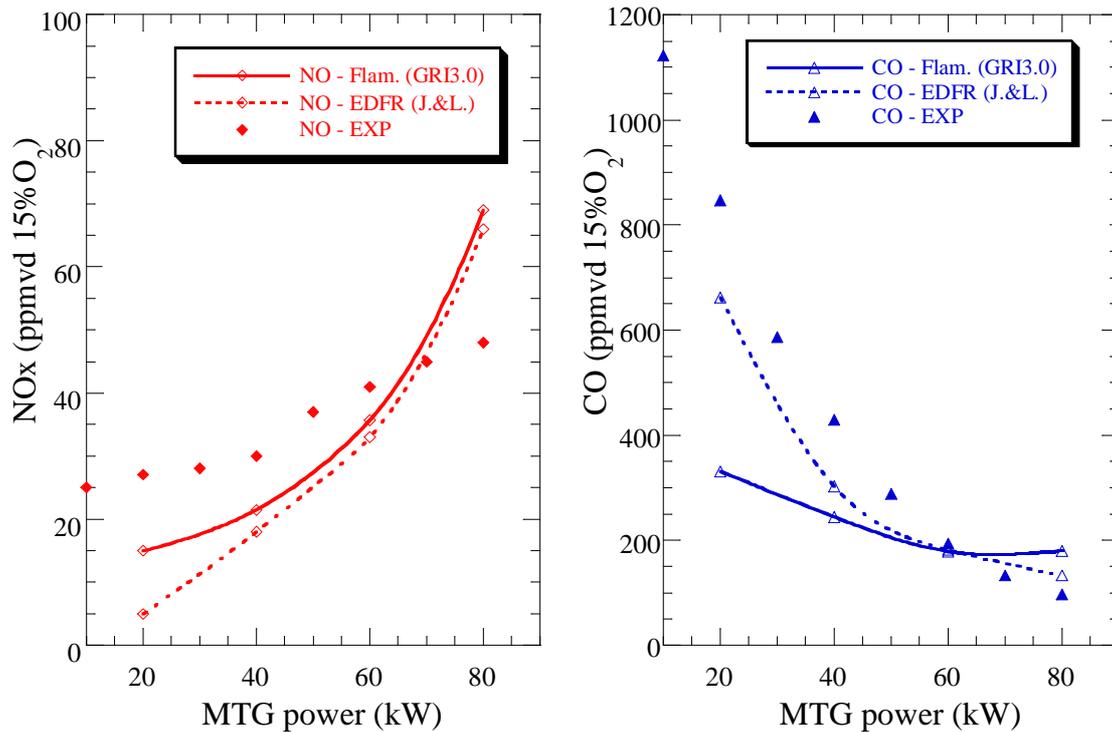


Fig 7.14

Le simulazioni rappresentano abbastanza fedelmente il *trend* dei dati sperimentali misurati in laboratorio sul prototipo di Microturbina Elliott TA 80 installata a scopo di ricerca. In particolare si nota la tendenza ad un aumento degli NO_x da un valore minimo pari a 25 ppm_{vd} fino ad un massimo inferiore alle 50 parti per milione *volume dry*. Le simulazioni presentano una variazione più marcata al variare della regolazione ma con differenze contenute. La discordanza aumenta avvicinandosi alle condizioni di pieno carico. Le simulazioni, in questa condizione prevedono un aumento degli NO_x avvicinandosi alle condizioni di design: questo è imputabile alla maggior quantità di combustibile che innalza maggiormente le temperature in camera primaria. Il successivo brusco calo del rapporto di equivalenza penalizza le emissioni nonostante la tecnica di combustione ricopero produca valori in uscita molto bassi nel complesso.

A destra sono riportate le emissioni di CO. In questo caso si ha un ottimo accordo fra le previsioni numeriche e i dati sperimentali nell'avvicinarsi alle condizioni di pieno carico. Il modello Flamelet integrato con le simulazioni Unsteady Flamelet risponde più lentamente all'individuazione dei CO fornendo valori mediamente più ottimistici.

Per concludere i risultati di emissione si riporta una tabella con i valori di emissione all'uscita come confronto fra combustione del singas e del metano [28]:

VALORI ALL'USCITA MGT Pieno carico	Fuel: CH₄ Flamelet GRI 3.0	Fuel: CH₄ ED-FR J.&L.	Fuel: SG Flamelet GRI 3.0	Fuel: SG ED-FR J.&L.
CO [ppm 15% O ₂]	180	133	59	1
CO ₂ [% vol]	1.4	1.4	4.1	4.5
NO [ppm 15% O ₂]	69	66	3.5	5.4
O ₂ [% vol]	17.9	18.4	17.7	16.9
H ₂ O [% vol]	2.8	3.0	2.2	2.5
T [K]	1105	1119	1085	1089

Tab 7.6

Esaminando questa tabella si nota come le emissioni valutate all'uscita della camera di combustione risultino minori per quanto riguarda l'alimentazione di gas derivante da pirolisi da biomasse. Le emissioni sono espresse in parti per milione (volume dry) ed è interessante confrontarle con i limiti ambientali imposti, ad esempio, nello stato italiano pari a 450 [mg/Nm³] di NO_x e 100 [mg/Nm³] di CO in vigore per impianti di taglia inferiore a 3 [MW]. Facendo le opportune conversioni si riscontra una soglia massima ammessa pari a 75 [ppm_{vd}] di NO_x decisamente rispettata nel caso del singas e rispettata al limite nel caso di alimentazione a metano. Anche per il CO il singas consente il rispetto delle leggi mentre l'alimentazione a metano è appena sopra le emissioni e richiede altri accorgimenti per un esercizio sicuro. In tabella 7.6 le emissioni inquinanti sono state ottenute in diversi modi. Nelle colonne 2 e 4 sono riportati i risultati di emissione proposti dal modello *Steady Laminar Flamelet* combinato con la successiva applicazione del modello *Unsteady Flamelet* (vedi paragrafo 3.2.4) mentre, nel caso delle colonne 3 e 5, la simulazione di combustione con il meccanismo ED-FR è stata seguita dall' *NO_x post-processing* messo a disposizione dal codice FLUENT, una simulazione volta a predire la formazione degli inquinanti a chimica lenta, come gli NO_x. La simulazione prende in esame tutti i meccanismi di formazione degli NO_x, in particolare risulta un minor valore di emissione nel caso di combustione con singas modellato con il meccanismo ED-FR. Infatti il singas, sviluppando temperature minori del metano risulta un combustibile più adatto al contenimento degli NO_x termici. L'abbassamento delle emissioni a valori ancor minori è dovuto alla combinazione d'uso di questo combustibile accoppiato all'uso della tecnologia di bruciatore RQL il cui scopo è proprio quello di abbattere le condizioni di formazione dei *thermal* NO_x. In esso la combustione in camera ricca non dà luogo a sufficiente ossigeno affinché si abbia la formazione di NO mentre in camera povera, pur avendo elevata concentrazione di ossigeno, non si ha la sufficiente temperatura di attivazione per innescare il meccanismo di formazione dell'inquinante. Il pericolo di formazione nel passaggio fra le due camere è infine scongiurato grazie alla elevata velocità di passaggio che toglie il tempo necessario affinché possa instaurarsi la chimica relativamente lenta della formazione di NO_x. Le misure di velocità realizzate nella sezione di gola delle simulazioni restituiscono velocità comprese fra i 100 m/s e i 150 m/s, sufficienti per impedire il legame fra ossigeno e azoto ad alta temperatura. Nasce così un interessante vantaggio nella applicazione combinata del singas come combustibile, congiunto con la tecnologia *RQL* di combustione, che determina una ottima efficienza nell'abbattimento delle emissioni.

Siccome con qualunque grado di regolazione la regione più delicata di innesco delle reazioni risulta essere quella interna all'ugello, dove i reagenti si incontrano, sono stati esaminati i sei piani intermedi in cui l'ugello è stato suddiviso in fase di definizione della griglia di calcolo. In realtà sono state esaminate diverse grandezze interne all'ugello, quali profili di velocità, concentrazione delle specie, progresso di reazione. Si riporta a seguito il più interessante risultato di temperatura come confronto fra metano e singas:

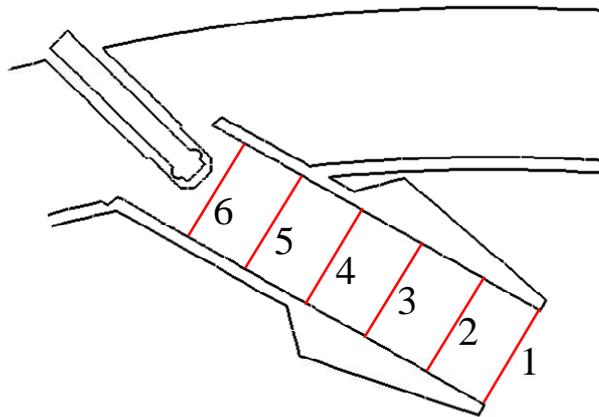
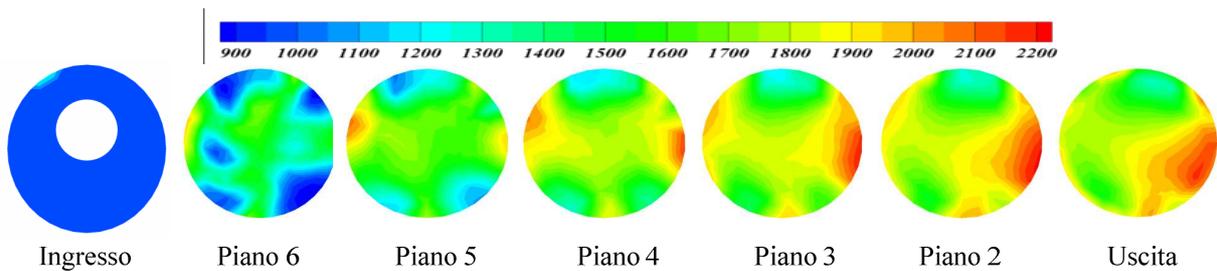


Fig 7.15

In figura 7.15 (sopra) è rappresentata la disposizione dei piani di misura presi in considerazione. Di essi è visibile nelle immagini sottostanti di figura 7.16 il confronto delle distribuzioni di temperatura al variare del combustibile. Come mostrano le immagini l'architettura dell'iniettore a tre fori presente nel caso del metano permette una combustione anticipata all'interno del mixing tube e si notano temperature maggiormente distribuite in tutto il condotto dovute alla componente radiale imposta dai tre getti di uscita. Nel caso del singas la combustione viene innescata più a valle, in prossimità del piano 5 e si mantiene più concentrata sull'asse del mixing tube.

TEMPERATURA UGELLO DI INIEZIONE – Alimentazione a Gas Naturale



TEMPERATURA UGELLO DI INIEZIONE – Alimentazione con Singas

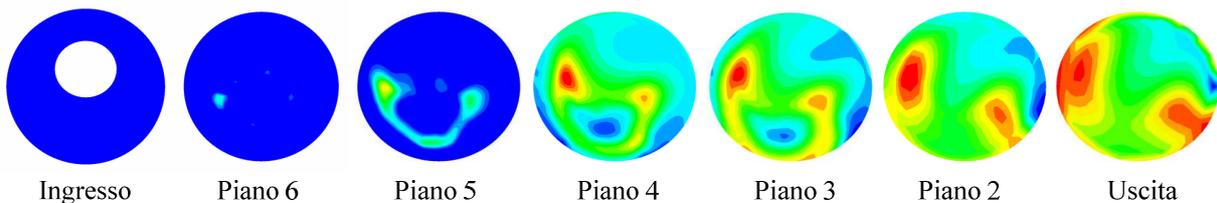


Fig 7.16

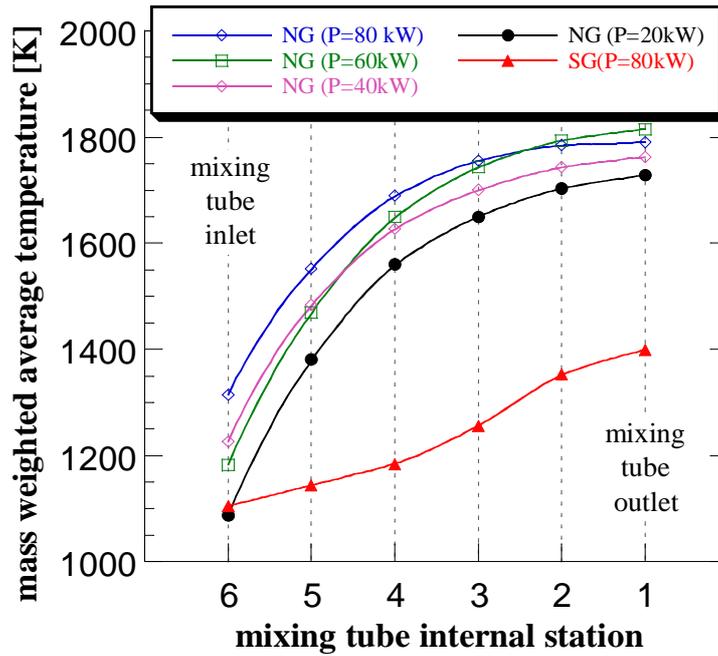


Fig 7.17

La posizione dei sei piani di misura si può vedere nel disegno schematico dell'ugello di figura 7.15 [28]. Sotto di esso nel grafico di figura 7.17 si nota una rappresentazione grafica della distribuzione di temperatura nei sei piani che mostrano la propagazione delle reazioni spostandosi dall'ingresso dell'aria verso l'uscita dell'ugello. Questo evolversi del profilo di temperatura è stato prodotto con riferimento alla combustione *Flamelet* per entrambi i combustibili. Infine il grafico sopra riportato riproduce un quadro generale dell'indagine effettuata all'interno dell'ugello mostrando l'incremento medio di temperatura su ogni piano di misura esaminato e l'andamento delle temperature massime sui suddetti piani al variare delle condizioni di regolazione. Si nota una traslazione delle curve verso temperature più basse man mano che aumenta la parzializzazione di aria e combustibile.

8 CONCLUSIONI

In questa tesi di dottorato sono stati riproposti i principali risultati ottenuti sull'attività di studio numerico di combustione di gas a basso potere calorifico. Dopo questo lavoro finale che riassume i più salienti risultati ottenuti dai tanti problemi risolti sui diversi bruciatori esaminati si può concludere che la simulazione di combustione è uno strumento sicuramente efficace per testare in tempi contenuti e costi accettabili l'importante ricerca nel campo dei combustibili alternativi. Si è dimostrato che i gas derivanti da pirolisi presentano caratteristiche di combustione interessanti e migliori proprietà in termini di emissioni inquinanti nelle applicazioni a MTG con combustione ricca-povera, rispetto ai combustibili tradizionali fossili. Si possono quindi presupporre risvolti interessanti all'applicazione distribuita di questa tecnologia di combustione a sistemi cogenerativi di piccola taglia in cui le MTG possano essere alimentate con combustibili rinnovabili. Inoltre, al fine di ampliare ancor più la diffusione di impianti di questo tipo, può risultare interessante modificare opportunamente le portate ed eventualmente le geometrie dei bruciatori affinché possano essere sfruttati con successo entrambi i combustibili rinnovabili e non per poter coinvolgere così nel campo dell'utilizzo dei rinnovabili anche gli impianti esistenti. L'ottimizzazione di macchine ottimizzate di questo tipo è sicuramente realizzabile appoggiandosi alla numerica, come già è stato in parte fatto nella durata di questo dottorato di ricerca.

Dall'analisi LES svolta sul bruciatore sperimentale che è stata proposta si nota un buon accordo con i dati sperimentali. Questo risultato è incoraggiante e l'approfondimento di questo tipo di analisi numerica potrà aumentare ulteriormente le conoscenze e le proprietà della combustione di gas derivante da biomasse. Visti i buoni risultati raggiunti si ritiene possibile estendere l'utilizzo del modello LES di turbolenza anche allo studio della combustione nella MTG che rappresenta la macchina finale sulla quale concentrare gli sforzi e il miglioramento tecnologico. In un prossimo futuro sarà possibile testare inoltre diverse composizioni del gas di sintesi, nuovi modelli di combustione e diversi meccanismi di reazione LES e RANS capaci di modellare ancor più efficacemente la combustione di questi gas.

In merito all'utilizzo della Large Eddy Simulation si è in questo anno tentato un primo approccio partendo da una situazione dove questo tipo di tecnica non era mai stata utilizzata. I risultati sono stati soddisfacenti ma sicuramente migliorabili con un adeguato approfondimento. In particolare si ritiene interessante testare modelli di sottogriglia ancor più sofisticati del modello di Smagorinski e concentrarsi sulla introduzione di modelli di parete che portino alla correzione delle sovrastime di temperatura e velocità ad oggi identificati. La ricerca di un modello ottimo che possa rappresentare numericamente il comportamento dei gas derivanti da biomasse è infatti lo scopo ultimo di questo lavoro, al fine di rendere l'applicazione di queste simulazioni adatte anche ad altri sistemi energetici oltre a quelli esaminati in questo lavoro. Ad ogni modo la conoscenza dei modelli considerato RANS e LES che è stata acquisita nel corso dei tre anni è stato un ottimo punto di partenza capace di fornire già risultati incoraggianti e stimoli al loro utilizzo futuro.

9 SIMBOLOGIA

$T = t$:	Tempo
x, y, z	:	Direzioni spaziali
ϕ	:	Generica grandezza fisica (oppure) Rapporto di equivalenza
ρ	:	Massa volumica
V	:	Volume
S_V	:	Variazione di ϕ dovuta a flussi attraverso la superficie di contorno
D_ϕ	:	Coefficiente di diffusione
S_ϕ	:	Termine sorgente locale per unità di volume
\mathbf{u}	:	Vettore velocità, di componenti u, v, w
\mathbf{n}	:	Versore normale ad una superficie
S	:	Superficie
$V_{D\phi}$:	Vettore di diffusione molecolare
m	:	Massa
\mathbf{F}	:	Vettore forza
\mathbf{a}	:	Vettore accelerazione
\mathbf{G}	:	Risultante delle forze di massa
\mathbf{f}	:	Forza specifica di massa
$\mathbf{\Pi}$:	Risultante delle forze di superficie
σ	:	Tensione normale
τ	:	Tensione tangenziale
φ	:	Angolo
μ	:	Viscosità dinamica
μ'	:	Secondo coefficiente di viscosità dinamica
ε_V	:	Deformazione volumetrica
$P = p$:	Pressione
$\bar{\boldsymbol{\tau}} = \boldsymbol{\tau}_{ij}$:	Tensore degli sforzi
$\bar{\mathbf{S}} = \mathbf{S}_{ij}$:	Tensore delle deformazioni
E	:	Energia totale
λ_c	:	Coefficiente di diffusione
S_h	:	Lavoro compiuto sul o dal sistema imputabile alle forze di massa
h	:	Entalpia specifica
H	:	Entalpia totale
$\tilde{\phi}$:	Generica grandezza mediata secondo Favre
\tilde{u}	:	Media di Favre della velocità
$u'' = u'$:	Componente fluttuante della velocità
\bar{u}	:	Componente media della velocità
Re	:	Numero di Reynolds
L	:	Lunghezza caratteristica
ν	:	Viscosità cinematica
k	:	Energia cinetica turbolenta (oppure) Numero d'onda

g	:	Accelerazione di gravità
c_p	:	Calore specifico a pressione costante
T	:	Temperatura
ε	:	Velocità di dissipazione dell'energia cinetica turbolenta
ϵ	:	Potenza trasferita nel processo della cascata energetica
η	:	Lunghezza caratteristica di Kolmogorov
u_η	:	Velocità caratteristica di Kolmogorov
t_η	:	Tempo caratteristico di Kolmogorov
u_ℓ	:	Velocità caratteristica di grande scala
$\ell_0 = \ell$:	Lunghezza caratteristica di grande scala
t_ℓ	:	Tempo caratteristico di grande scala
r	:	Dimensione caratteristica di un vortice
λ	:	Lunghezza d'onda
C	:	Costante di Kolmogorov (oppure) Costante di Smagorinsky
$f(\mathbf{x}, t)$:	Generica funzione
$G_\Delta(\mathbf{x})$:	Funzione filtro
$\bar{f}(\mathbf{x}, t)$:	Convoluzione di funzione
Δ	:	Dimensione della cella e dimensione di taglio del filtro <i>box</i>
$H()$:	Heaviside <i>function</i>
ΔT	:	Intervallo temporal infinitesimo
$\check{\phi}$:	Generica grandezza filtrata
ϕ_r	:	Parte residua del filtraggio della generica grandezza ϕ
τ_{ij}^R	:	Tensore degli sforzi di sottogriglia
H_{ij}^R	:	Entalpia residua di sottogriglia
ν_T	:	Viscosità turbolenta
τ_{fl}	:	<i>Eddy turnover time</i>
τ_{ch}	:	<i>Chemical time</i>
Da	:	Numero di Damkohler
$Y = x$:	Generica frazione in massa
Y_{oss}	:	Frazione in massa di ossidante
Y_{comb}	:	Frazione in massa di combustibile
x_R	:	Frazione in massa di un reagente
x_P	:	Frazione in massa di un prodotto di reazione
s	:	Generica specie chimica
ω_s	:	Tasso di produzione della specie s
Z	:	Frazione di miscela
$\dot{m}_f = \dot{m}_c$:	Portata in massa di combustibile
\dot{m}_o	:	Portata in massa di ossidante
$Z_{F,u}$:	Valore della frazione di miscela all'ingresso della corrente di combustibile
$Z_{O,u}$:	Valore della frazione di miscela all'ingresso della corrente di ossidante
$Y_{F,f}$:	Valore della frazione in massa di combustibile nella corrente di combustibile
$Y_{F,o}$:	Valore della frazione in massa di combustibile nella corrente di ossidante

$Y_{O,f}$:	Valore della frazione in massa di ossidante nella corrente di combustibile
$Y_{O,o}$:	Valore della frazione in massa di ossidante nella corrente di ossidante
ℓ_r	:	Spessore <i>dell'inner layer</i>
Z_{st}	:	Frazione di miscela stechiometrica
Z'^2	:	Varianza della frazione di miscela
Z_1, Z_2, Z_3	:	Coordinate nello spazio della frazione di miscela
N	:	Numero di specie chimiche (oppure) Numero di <i>time steps</i>
χ	:	<i>Scalar dissipation</i>
Le	:	Numero di Lewis
D_z	:	Coefficiente di diffusione nello spazio della frazione di miscela
a	:	<i>Strain rate</i>
ρ_∞	:	Densità nella corrente di comburente
$erfc$:	Funzione di errore complementare
χ_{st}	:	Scalar dissipation stechiometrica
<i>SLFM</i>	:	<i>Steady Laminar Flamelet Model</i>
$PDF = p(z)$:	Funzione Densità di probabilità
$\Delta\chi$:	Intervallo di valori della <i>scalar dissipation</i>
α, β, γ	:	Coefficienti della funzione densità di probabilità $\beta - PDF$
\tilde{I}_j	:	Frazione in massa della particella j-esima rispetto al totale delle particelle
Sc_j	:	Numero di Schmidt turbolento
$Slpm$:	<i>Standard litri al minuto</i>
\dot{m}_{air}	:	Portata in massa di aria
λ_{st}	:	Rapporto di miscela stechiometrico
<i>RQL</i>	:	Combustore <i>Rich-burn, Quick-mix, Lean burn</i>
\dot{m}_{air_prim}	:	Portata in massa di aria primaria
\dot{m}_{air_sec}	:	Portata in massa di aria secondaria
<i>MTG1 o 2</i>	:	Geometrie 1 e 2 della Microturbina a gas Elliott TA 80
<i>RSM</i>	:	<i>Reynolds Stress Model</i>
<i>ED</i>	:	<i>Eddy Dissipation Model</i>
<i>ED - FR</i>	:	<i>Eddy Dissipation - Finite Rate Model</i>
<i>RANS</i>	:	<i>Reynolds Average Navier-Stokes Equations</i>
<i>LES</i>	:	<i>Large Eddy Simulation</i>
t_s	:	<i>Time step</i>
$\ell_{cut-off}$:	Lunghezza caratteristica di filtraggio

10 BIBLIOGRAFIA

Bibliografia al Capitolo 1

- [27] Fantozzi F., Bianchi M., Pinelli M., Laranci P., De Pascale A., Cadorin M., *CFD Simulation of a microturbine annular combustion chamber fuelled with methane and biomass pyrolysis syngas – Preliminary results*, ASME Turbo Expo 2009 – GT 2009 – 60030
- [28] De Pascale A., Fantozzi F., Fussi M., Laranci P., Peretto A., *Experimental and numerical analysis of natural gas and pyrolysis syngas combustion in a microturbine combustor*, ASME-ATI-UIT, 2010

Bibliografia al Capitolo 2

- [1] Kuo K. K., *Principles of combustion*, Wiley, 1986
- [2] Poinot T., Veynante D., *Theoretical and Numerical Combustion*, Edwards, 2001
- [3] White F. M., *Fluid mechanics*, McGraw Hill, 1986
- [4] Pope S. B., *Turbulence flows*, Cambridge Univ. press, 2000
- [5] Versteeg H. K., Malalasekera W., *An introduction to Computational Fluid Dynamics, The finite Volume Method*, Longman, 1996
- [6] Marchi E., Rubatta A., *Meccanica dei fluidi – Principi e applicazioni idrauliche*, UTET
- [7] Undapalli S., *Large Eddy Simulation and Non-premixed Combustion in a Stagnation Point Reverse Flow Combustor*, PhD thesis, 2008
- [9] Peters N., *Turbulent Combustion*, Cambridge Univ. press
- [10] Kolmogorov A.N., *The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds Number*, C.R. Acad. Sci., 1941
- [11] Ciofalo M., *Dispense di turbolenza*
- [12] FLUENT 6.0 *User's Guide*, Fluent Inc., 2001
- [13] Vreman B., Geurts B., Kuerten R., *Sub-grid Modelling in LES of Compressible Flows*, Kluwer Acad., 1995

Bibliografia al Capitolo 3

- [1] Kuo K. K., *Principles of combustion*, Wiley, 1986
- [4] Pope S. B., *Turbulence flows*, Cambridge Univ. press, 2000
- [7] Undapalli S., *Large Eddy Simulation and Non-premixed Combustion in a Stagnation Point Reverse Flow Combustor*, PhD thesis, 2008
- [11] Ciofalo M., *Dispense di turbolenza*
- [12] FLUENT 6.0 *User's Guide*, Fluent Inc., 2001
- [13] Vreman B., Geurts B., Kuerten R., *Sub-grid Modelling in LES of Compressible Flows*, Kluwer Acad., 1995
- [14] Bataille F., Rubinstein R., Hussaini M.Y., *Eddy viscosity and diffusivity modeling*, Elsevier, 2005

Bibliografia al Capitolo 4

- [2] Poinot T., Veynante D., *Theoretical and Numerical Combustion*, Edwards, 2001
- [9] Peters N., *Turbulent Combustion*, Cambridge Univ. press
- [12] FLUENT 6.0 *User's Guide*, Fluent Inc., 2001
- [15] Bilger R. W., Pope S. B., Bray K. N. C., Driscoll J. F., *Paradigms in turbulent combustion research*, Elsevier, 2005

- [16] Renard P. H., Thevenin D., Rolon J. C., Candel S., *Dynamics of flame/vortex interactions*, Combustion Institute and Combustion Science, 2000
- [17] Buckmaster J., Clavin P., Linan A., Matalon M., Peters N., Sivashinsky G., Williams F. A., *Combustion Theory and Modeling*, Combustion Institute, 2005
- [18] Pitsch H., Peters N., *A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects*, Combustion Institute, 1998
- [19] Linan A., *The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energy*, Pergamon press, 1974
- [20] Katta V. R., Roquemore W. M., *On the Structure of a Stretched/Compressed Laminar Flamelet- Influence of Preferential Diffusion*, Combustion Institute.
- [21] Mahalingam H. et al., *Analysis and Numerical Simulation of a Nonpremixed Flame in a Corner*, Combustion Institute, 1999
- [22] Huang H., Chen Y., *Steady flamelet modelling of a turbulent non-premixed flame considering scalar dissipation rate fluctuations*, Elsevier, 2005
- [23] Williams F. A., *Progress in Knowledge of Flamelet Structure and Extinction*, Energy and Combustion Science, Pergamon, 2000
- [24] Barths H., Peters N., Brehm N., Mack A., Pfitzner M., Smiljanovsky V., *Simulation of pollutant formation in gas-turbine combustor using unsteady flamelets*, Combustion Institute, 1998
- [25] Pitsch H., Cha C. M., Fedotov S., *Flamelet modelling of non-premixed turbulent combustion with local extinction and re-ignition*, Institute of physics publishing, 2003
- [26] Pitsch H., Chen M., Peters N., *Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames*, Combustion Institute, 1998

Bibliografia al Capitolo 5

- [12] FLUENT 6.0 *User's Guide*, Fluent Inc., 2001
- [27] Fantozzi F., Bianchi M., Pinelli M., Laranci P., De Pascale A., Cadorin M., *CFD Simulation of a microturbine annular combustion chamber fuelled with methane and biomass pyrolysis syngas – Preliminary results*, ASME Turbo Expo 2009 – GT 2009 – 60030
- [28] De Pascale A., Fantozzi F., Fussi M., Laranci P., Peretto A., *Experimental and numerical analysis of natural gas and pyrolysis syngas combustion in a microturbine combustor*, ASME-ATI-UIT, 2010
- [29] Casarsa L., Micheli D., Pediroda V., Radu R., *Investigations of pyrolysis syngas swirl flames in a combustor model*, ASME Turbo Expo 2009 - GT2009-59610
- [30] De Pascale A., Fussi M., Peretto A., *Numerical simulation of biomass derived syngas combustion in a swirl flame combustor*, ASME Turbo Expo 2010 – GT2010-22791

Bibliografia al Capitolo 6

- [2] Poinso T., Veynante D., *Theoretical and Numerical Combustion*, Edwards, 2001
- [4] Pope S. B., *Turbulence flows*, Cambridge Univ. press, 2000
- [12] FLUENT 6.0 *User's Guide*, Fluent Inc., 2001
- [29] Casarsa L., Micheli D., Pediroda V., Radu R., *Investigations of pyrolysis syngas swirl flames in a combustor model*, ASME Turbo Expo 2009 - GT2009-59610
- [30] De Pascale A., Fussi M., Peretto A., *Numerical simulation of biomass derived syngas combustion in a swirl flame combustor*, ASME Turbo Expo 2010 – GT2010-22791
- [31] Jones W. P., Lander B. E., *The prediction of laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence*, Int. J. Heat and Mass Transfer, vol. 15, pp. 301-314,
- [32] Jones W.P., Linstedt R.P., *Global reaction schemes for hydrocarbon combustion*, Combustion flame 73, 1988

- [33] De Pascale A., Peretto A., Fussi M., Vecci R., *Numerical investigation of a swirled flame model combustor fed with pyrolysis gas*, Proceeding for ECOS 2011
- [34] Kempf A., Malalasekera W., *Large Eddy Simulation of Swirling Non-Premixed Flames with Flamelet Models: A Comparison of Numerical Methods*, Flow Turbulent Combust., 2008

Bibliografia al Capitolo 7

- [12] FLUENT 6.0 *User's Guide*, Fluent Inc., 2001
- [27] Fantozzi F., Bianchi M., Pinelli M., Laranci P., De Pascale A., Cadorin M., *CFD Simulation of a microturbine annular combustion chamber fuelled with methane and biomass pyrolysis syngas – Preliminary results*, ASME Turbo Expo 2009 – GT 2009 – 60030
- [28] De Pascale A., Fantozzi F., Fussi M., Laranci P., Peretto A., *Experimental and numerical analysis of natural gas and pyrolysis syngas combustion in a microturbine combustor*, ASME-ATI-UIT, 2010
- [35] GRI-Mech web site, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech
- [36] Smooke M.D., Puri K.I., Seshadri K., Proc. Comb. Inst. 21, 1986